



## **ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

### **DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE FRACCIONAMIENTO DEL PRODUCTO LÍQUIDO DE PIRÓLISIS DE POLIPROPILENO, PARA LA IDENTIFICACIÓN DE PRECURSORES QUÍMICOS**

**JOHANA ESTEFANIA ORNA QUINTANILLA**

Trabajo de Titulación modalidad: Proyectos de Investigación y Desarrollo,  
presentado ante el Instituto de Posgrado y Educación Continua de la  
ESPOCH, como requisito parcial para la obtención del grado de:

**MAGÍSTER EN INGENIERÍA QUÍMICA APLICADA**

**RIOBAMBA – ECUADOR**

Enero 2022

**©2022, Johana Estefanía Orna Quintanilla**

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.



## ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

### CERTIFICACIÓN:

EL TRIBUNAL DE TRABAJO DE TITULACIÓN CERTIFICA QUE:

El **Trabajo de Titulación** modalidad **Proyectos de Investigación y Desarrollo**, titulado **DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UNA TORRE DE FRACCIONAMIENTO DEL PRODUCTO LÍQUIDO DE PIRÓLISIS DE POLIPROPILENO, PARA LA IDENTIFICACIÓN DE PRECURSORES QUÍMICOS**”, de responsabilidad de la señorita Johana Estefanía Orna Quintanilla, ha sido prolijamente revisado y se autoriza su presentación.

Ing. Juan Carlos González García.Ph. D.

**PRESIDENTE**



Firmado electrónicamente por:  
**JUAN CARLOS  
GONZALEZ  
GARCIA**

Ing. Paul Gustavo Palmay Paredes. Mag.

**DIRECTOR**



Firmado electrónicamente por:  
**PAUL GUSTAVO  
PALMAY PAREDES**

Ing. Mayra Paola Zambrano Vinueza. Mag.

**MIEMBRO**



Firmado electrónicamente por:  
**MAYRA PAOLA  
ZAMBRANO  
VINUEZA**

Ing. Cesar Arturo Puente Guijarro. Ph. D.

**MIEMBRO**



Firmado electrónicamente por:  
**CESAR ARTURO  
PUENTE GUIJARRO**

Riobamba, enero 2022

## **DERECHOS INTELECTUALES**

Yo, Johana Estefanía Orna Quintanilla soy responsable de las ideas, doctrinas y resultados expuestos en este Trabajo de Titulación y el patrimonio intelectual del mismo pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.



---

Johana Estefanía Orna Quintanilla

No. Cédula: 0605871276

## DECLARACIÓN DE AUTENTICIDAD

Yo, Johana Estefanía Orna Quintanilla, declaro que el presente **Trabajo de Titulación modalidad Proyectos de Investigación y Desarrollo**, es de mi autoría y que los resultados del mismo son auténticos y originales. Los textos constantes en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor, asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este proyecto de investigación de Maestría.



---

Johana Estefanía Orna Quintanilla

No. Cédula: 0605871276

## **DEDICATORIA**

A Dios, mi esposo, familia que me dieron ánimo para cumplir esta meta que me he propuesto, a mis docentes y tutores que me han brindado sus conocimientos.

## **AGRADECIMIENTO**

A Dios, al apoyo incondicional de mi esposo Estalín Romero, padres, docentes, miembros de tribunal y la IPEC que con su aporte académico, humano y moral; han permitido la obtención de este nivel de formación.

Johana

## CONTENIDO

	Páginas
<b>RESUMEN</b> .....	xiv
<b>SUMMARY</b> .....	xv
<b>CAPÍTULO 1</b> .....	1
1. INTRODUCCIÓN .....	1
1.1 Problema de investigación .....	1
1.1.1 Planteamiento del problema.....	1
1.1.2 Formulación del problema .....	2
1.1.3 Preguntas directrices.....	2
1.2 Justificación de la investigación.....	2
1.3 Objetivos generales y específicos .....	3
1.3.1 Objetivo general .....	3
1.3.2 Objetivos específicos.....	3
<b>CAPÍTULO II</b> .....	4
2. MARCO TEÓRICO.....	4
2.1 Antecedentes de la Investigación .....	4
2.2 Bases Teóricas.....	5
2.2.1 Plástico .....	5
2.2.2 Clasificación de los plásticos .....	6
2.2.3 Polipropileno .....	7
2.2.3.1 Propiedades polipropileno.....	7
2.2.3.2 Estructura y morfología del polipropileno. ....	9
2.2.4 Pirólisis.....	10
2.2.5 Productos de pirólisis .....	11
2.2.6 Tipos de pirólisis.....	12
2.2.6.1 Pirólisis térmica.....	12
2.2.6.2 Pirolisis catalítica .....	12
2.2.7 Cromatografía .....	14
2.2.7.1 Tipos de cromatografía .....	15
2.2.8 Tipos de destilación.....	16
2.2.8.1 Destilación Simple .....	16
2.2.8.2 Destilación simple a presión atmosférica.....	16

2.2.8.3	Destilación simple a presión reducida.....	17
2.2.8.4	Destilación por arrastre de vapor .....	17
2.2.8.5	Destilación fraccionaria .....	17
2.2.9	Destilación de mezclas de multicomponentes.....	18
2.2.9.1	Métodos de cálculo del diseño .....	19
2.2.9.2	Equilibrios entre fases para la destilación multicomponente .....	20
2.2.9.3	Cálculo del punto de burbuja y del punto de rocío .....	21
2.2.9.4	Componentes clave .....	22
2.2.9.5	Método de Fenske, Underwood y Gilliland (FUG).....	23
2.2.10	Tipos de Condensadores .....	26
2.2.10.1	Condensador total.....	26
2.2.10.2	Condensador parcial.....	26
2.2.11	Factores que afectan la operación de una columna de destilación .....	27
2.2.11.1	Condiciones del alimento .....	27
2.2.11.2	Condiciones de reflujo .....	27
2.2.11.3	Condiciones de flujo de vapor.....	28
2.2.12	VARIABLES DE PROCESO .....	29
2.2.13	Simulador de procesos .....	31
2.2.13.1	Etapas para el desarrollo de la simulación .....	31
2.2.14	Modelos termodinámicos .....	34
2.2.14.1	Ecuaciones de Estado.....	34
2.2.15	Simulador DWSIM .....	36
<b>CAPÍTULO III.....</b>		<b>37</b>
3.	METODOLOGÍA .....	37
3.1	Introducción .....	37
3.2	Hipótesis e Identificación de variables.....	37
3.2.1	Hipótesis.....	37
3.2.1.1	Hipótesis general.....	37
3.2.1.2	Hipótesis específicas .....	37
3.2.2	Identificación de las variables .....	38
3.2.2.1	VARIABLES INDEPENDIENTES .....	38
3.2.2.2	VARIABLES DEPENDIENTES.....	38
3.2.3	Operacionalización de variables y matriz de consistencia. ....	38
3.3	Tipo y diseño de investigación.....	40
3.4	Métodos de investigación.....	41
3.5	Enfoque y alcance de la investigación .....	41

3.6	Unidad de análisis y muestra.....	42
3.7	Técnicas de recolección de datos .....	42
3.8	Diseño de la torre de fraccionamiento.....	42
3.9	Procedimiento de cálculo .....	43
3.9.1	Compuestos inmersos en la Pirolisis de polipropileno.....	43
3.9.2	Cálculos de la temperatura de burbuja .....	44
3.9.2.1	Cálculo presión de vapor.....	44
3.9.2.2	Volatilidad relativa.....	46
3.9.2.3	Volatilidad relativa con respecto a la fracción de alimentación.....	47
3.9.2.4	Obtención de la fracción del destilado. ....	48
3.9.2.5	Obtención de la presión en función de la fracción del destilado.....	49
3.9.2.6	Obtención de la presión de vapor en función de la fracción de alimentación.....	50
3.9.2.7	Obtención de la temperatura de ebullición en función de las volatilidades .....	51
3.9.2.8	Cálculos de la temperatura de Roció.....	52
3.9.3	Cálculos del método corto (Parámetros necesarios para la simulación) .....	52
3.9.3.1	Composición en el tope y el fondo.....	52
3.9.3.2	Cálculo del número mínimo de platos. (Fenske).....	53
3.9.3.3	Cálculo para encontrar como ingresa la alimentación en la torre .....	53
3.9.3.4	Cálculo para encontrar $\theta$ .....	54
3.9.3.5	Cálculo del reflujo mínimo. (Underwood).....	55
3.9.3.6	Localización del plato de alimentación (Kirkbride).....	55
3.9.4	Cálculos del método riguroso (Simulación).....	55
3.9.4.1	Selección de los compuestos de análisis .....	56
3.9.4.2	Paquete termodinámico .....	56
3.9.4.3	Ingreso de parámetros de entrada DWSIM.....	57
3.9.4.4	Ingreso de fracciones pirólisis catalítica .....	58
3.9.4.5	Ingreso de especificaciones requeridas para compilación.....	58
3.9.4.6	Condiciones para la simulación del condensador.....	59
3.9.4.7	Ingreso de condiciones de rehervidor (caldera) .....	59
3.9.4.8	Compilación final de programa (Torre de fraccionamiento).....	60
	<b>CAPÍTULO IV .....</b>	<b>61</b>
<b>4.</b>	<b>RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>61</b>
4.1	Resultados preliminares .....	61
4.1.2	Temperaturas de burbuja.....	61
4.1.3	Temperatura de rocío .....	62
4.1.4	Primera simulación en base al método corto.....	62

4.1.5	Optimización de condiciones en la simulación .....	63
4.2	Resultados finales.....	64
4.2.1	Variables y parámetros optimizados para la simulación final.....	64
4.2.2	Resultados finales de la simulación .....	65
4.2.3	Propiedades físico – químicas de los compuestos simulados.....	65
4.2.4	Validación .....	66
4.3	Discusión.....	67
	<b>CONCLUSIONES</b> .....	68
	<b>RECOMENDACIONES</b> .....	70
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	
	<b>ANEXOS</b>	

## INDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2:</b> Propiedades Físico – químicas del polipropileno.....	8
<b>Tabla 2-2:</b> Técnicas de cromatografía.....	14
<b>Tabla 1-3:</b> Operacionalización de variables independientes.....	38
<b>Tabla 2-3:</b> Operacionalización de variables dependientes.....	39
<b>Tabla 3-3:</b> Matriz de consistencia.....	39
<b>Tabla 4-3:</b> Compuestos inmersos en la Pirolisis de polipropileno.....	43
<b>Tabla 5-3:</b> Información de las propiedades químicas de los compuestos.....	43
<b>Tabla 6-3:</b> Resultados de las presiones parciales.....	46
<b>Tabla 7-3:</b> Datos de las concentraciones mediante el método corto.....	53
<b>Tabla 1-4:</b> Resumen datos temperatura de burbuja.....	61
<b>Tabla 2-4:</b> Resumen datos temperatura de rocío.....	62
<b>Tabla 3-4:</b> Datos de entrada para la simulación.....	62
<b>Tabla 4-4:</b> Datos simulación destilado.....	63
<b>Tabla 5-4:</b> Datos simulación fondo.....	63
<b>Tabla 6-4:</b> Optimización de la simulación.....	63
<b>Tabla 7-4:</b> Resultados destilado y fondo según optimización.....	64
<b>Tabla 8-4:</b> Variables para la simulación óptima.....	64
<b>Tabla 9-4:</b> Resultados de la simulación a condiciones óptimas.....	65
<b>Tabla 10-4:</b> Resultados propiedades simulación final.....	66
<b>Tabla 11-4:</b> Resultados del porcentaje de error relativo.....	66

## INDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2:</b> Código de identificación de resinas de plástico.....	6
<b>Figura 2-2:</b> Clasificación de los plásticos.....	7
<b>Figura 3-2:</b> Estructura 3D del pp. Color rojo (C) Y color amarillo (H).....	9
<b>Figura 4-2:</b> Estereoisómeros de polipropileno.....	9
<b>Figura 5-2:</b> Mecanismo de polimerización del polipropileno.....	10
<b>Figura 6-2:</b> Esquema de la pirolisis. ....	11
<b>Figura 7-2:</b> Productos de la obtención de la pirolisis.....	11
<b>Figura 8-2:</b> Estructura esquemática de la zeolita. ....	13
<b>Figura 9-2:</b> a) Cromatografía fase normal y b) Cromatografía fase reversa.....	15
<b>Figura 10-2:</b> a) Cromatografía iónico y b) Cromatografía exclusión. ....	16
<b>Figura 11-2:</b> Destilación fraccionaria. ....	18
<b>Figura 12-2:</b> Multicomponente. ....	19
<b>Figura 13-2:</b> Condensador Total.....	26
<b>Figura 14-2:</b> Condensador parcial.....	27
<b>Figura 15-2:</b> Inundación de un plato en una torre de destilación.....	29
<b>Figura 16-2:</b> Etapas para el desarrollo de simulación.....	31
<b>Figura 1-3:</b> Metodología propuesta – torre de fraccionamiento. ....	41
<b>Figura 2-3:</b> Flujograma determinación variables de entrada simulación.....	52
<b>Figura 3-3:</b> Ventana de selección de compuestos DWSIM. ....	56
<b>Figura 4-3:</b> Selección del paquete termodinámico.....	57
<b>Figura 5-3:</b> Ingreso de datos de entrada.....	57
<b>Figura 6-3:</b> Fracciones de compuestos en DWSIM. ....	58
<b>Figura 7-3:</b> Especificaciones DWSIM.....	59
<b>Figura 8-3:</b> Condiciones del condensador DWSIM.....	59
<b>Figura 9-3:</b> Condiciones de rehervidor DWSIM. ....	60
<b>Figura 10-3:</b> Esquema final de la simulación de la torre de fraccionamiento DWSIM.....	60

## RESUMEN

El objetivo principal del proyecto fue diseñar y simular una torre de fraccionamiento del producto líquido de la pirólisis de polipropileno, para la identificación de precursores químicos, dado que el polipropileno en el Ecuador a más de ser un material contaminante del medio ambiente, requiere una compleja gestión para su eliminación. Al procesar precursores químicos por medio de una torre de fraccionamiento; se contribuiría a la reutilización de desechos plásticos. Para el diseño en una primera instancia se analizó si las constantes de equilibrio dependían de las temperaturas de ebullición de los compuestos encontrados a partir de la cromatografía de la fase líquida de la pirólisis del polipropileno, después se planteó una presión de 1 atmósfera para iterar las gráficas de equilibrio con relación a las presiones y temperaturas de ebullición. Todo esto como parte del cálculo manual donde se determinaron y optimizaron las variables de entrada requeridas por el programa DWSIM para funcionar como: número de platos, plato de alimentación y relación de reflujo. Una vez estabilizados los valores de dichas condiciones de los 6 compuestos prioritarios; se alcanzó un 87.16% del componente clave ligero, así como un 99,93% del componente clave pesado en el fondo; porcentajes propios de una simulación optimizada y exitosa. Se recomendó cotejar los resultados de esta investigación con otros simuladores, así como la selección minuciosa del paquete termodinámico en función de los compuestos escogidos

**PALABRAS CLAVE:** <SIMULACIÓN>, <MÉTODO RIGUROSO>, <PIRÓLISIS>, <TORRE DE FRACCIONAMIENTO>, <FRACCIÓN MOLAR>, <DESTILACIÓN>, <MULTICOMPONENTE> .

LUIS  
ALBERTO  
CAMINOS  
VARGAS

Firmado digitalmente  
por LUIS ALBERTO  
CAMINOS VARGAS  
Nombre de  
reconocimiento (DN):  
c=EC, l=RIOBAMBA,  
serialNumber=0602766  
97A, cn=LUIS ALBERTO  
CAMINOS VARGAS  
Fecha: 2021.12.15  
08:40:50 -05'00'



0128-DBRAI-UPT-IPEC-2021

## SUMMARY

The main objective of the project was to design and simulate a fractionating tower for the liquid product of polypropylene pyrolysis, for the identification of chemical precursors, since polypropylene in Ecuador, in addition to being a polluting material for the environment, requires a complex management for its elimination. When processing chemical precursors by means of a fractionating tower; it would contribute to the reuse of plastic waste. In this sense, for the design, in the first instance, it was analyzed whether the equilibrium constants depended on the boiling temperatures of the compounds found from the chromatography of the liquid phase of the pyrolysis of polypropylene, then 1 atmosphere pressure was established to iterate the equilibrium graphics in relation to boiling pressures and temperatures. All this as part of the manual calculation where the input variables required by the DWSIM program were determined and optimized to function as: number of plates, feeding plate and reflux ratio. In this sense and once the values of mentioned conditions of the 6 priority compounds have been stabilized; 87.16% of the light key component was reached, as well as 99.93% of the heavy key component in the bottom; own percentages of an optimized and successful simulation. It was recommended to compare the results of this research with other simulators, as well as the careful selection of the thermodynamic package based on the chosen compounds.

**KEYWORDS:** <SIMULATION>, <RIGOROUS METHOD>, <PYROLYSIS>, <FRACTIONATING TOWER>, <MOLAR FRACTION>, <DISTILLATION>, <MULTICOMPONENT>

# CAPÍTULO 1

## 1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad el polipropileno debido a su extensa aplicación, especialmente en la producción de plásticos; ha generado desechos que posterior a su uso requieren una gestión de eliminación. Es ahí donde radica la necesidad de diseñar y simular procesos que aún no están implementados a fin de obtener información preliminar que permita disminuir costos de pruebas piloto y la obtención de información confiable, en el contexto de la eliminación de estos desechos. Con esta investigación se pretende dar continuidad a las investigaciones de los productos líquidos de la pirólisis catalítica de polipropileno, a fin de diseñar y simular una torre de fraccionamiento que separe los productos con potencial de ser precursores petroquímicos.

### 1.1 Problema de investigación

#### *1.1.1 Planteamiento del problema*

Los plásticos son derivados del petróleo, que contaminan a gran escala el mundo en el que vivimos debido a sus grandes prestaciones. Es muy económico y de fácil acceso, sin embargo, el plástico no se deteriora en al menos cien años, ocasionando un aumento de la contaminación plástica. Este hecho está afectando al planeta al contaminar nuestra agua derivando en escasez de ésta, además, también está arruinando nuestros suelos y tierras al mermar su fertilidad (Sophonrat, 2019). Los plásticos en general y específicamente el polipropileno se han posicionado como una de las principales materias primas; es el material más utilizado a nivel industrial puesto que tiene una elevada resistencia a soluciones acidas y básicas, resistencia al impacto y es capaz de soportar fuertes presiones lo que lo vuelve muy versátil (Segura, 2015) ¿Qué alternativas existen para la gestión de su eliminación?; si es conocido que esto supone un gran problema sanitario y medioambiental. Así también, se sabe que la producción nacional de artículos plásticos utiliza en un 100% materia prima proveniente de países como: Colombia, Brasil, e India, ya que el Ecuador no cuenta con Industria Petroquímica que produzca resinas plásticas. Ocasionando que la tasa de crecimiento anual de importaciones de este tipo de materia prima desde el año 2006 al 2014 sea del 7%.7(Superintendencia de Control del Poder de Mercado, 2016). Según investigaciones sobre alternativas de reciclaje de estos residuos del polipropileno; la pirólisis los revierte a un estado primario aprovechable, debido a que ayuda a degradar los polímeros a altas temperaturas en condiciones no oxidativas. (Wiriyampaiwong & Jamradloedluk, 2017). Si bien de este proceso

se obtienen fases sólidas, líquidas y gaseosas; resulta un problema el no tener identificados los precursores químicos que se podrían obtener de la fase líquida. Así también, no existe un procedimiento que muestre el diseño y simulación de una torre de fraccionamiento para los desechos líquidos de pirólisis del Polipropileno. La solución a esta problemática es un eje transversal del proyecto, en un contexto de reciclaje químico a los residuos plásticos; como fuente alterna a combustibles, hecho que necesita ser solventado.

### **1.1.2 Formulación del problema**

¿Se podrá conocer cuáles son los precursores químicos de los desechos líquidos de la pirolisis mediante el diseño y simulación de la torre de fraccionamiento?

### **1.1.3 Preguntas directrices**

¿Qué metodología y consideraciones de diseño permiten dimensionar una torre de fraccionamiento?

¿Cuáles son los parámetros de operación para el fraccionamiento de los componentes de residuos líquidos de la pirólisis de polipropileno?

¿Qué precursores químicos se obtendrán del fraccionamiento de los residuos líquidos de la pirolisis del polipropileno?

## **1.2 Justificación de la investigación**

El presente proyecto de titulación gira en torno al incremento de desechos plásticos que se generan cada día; si bien las excelentes características físico químicas del polipropileno, lo han posicionado como la materia prima de innumerables plásticos utilizados ampliamente en industrias; éstos al momento de ser desechados suponen un reto en la gestión de su eliminación, debido a su lento proceso de degradación natural. (Ramos, Pretell, & Lujan, 2019). Es ahí, donde en países como Ecuador que no cuentan con una industria petroquímica local posicionada, que abarate costos de insumos industriales procedentes del petróleo; la pirólisis cumple un papel crucial en el aprovechamiento de este residuo, dado que al fraccionar la fase líquida proveniente de este proceso; se podrían identificar precursores químicos; mismos que son sustancias que se utilizan principalmente para la producción legítima (legal), de una amplia gama de productos, como medicinas, perfumes, plásticos y cosméticos(Unidas, Internacional, & Estupefacientes, 2010).

Por lo tanto, la importancia de lo antes descrito radica en que la presente investigación va más allá de una solución ambiental; la misma establece una solución al requerimiento del proyecto que lleva por nombre “Reciclaje químico: degradación térmica y catalítica de residuos plásticos como fuente alterna de combustibles”; solución que propone el procedimiento de diseño y simulación de una torre de fraccionamiento, para los desechos líquidos de la pirólisis del Polipropileno. Beneficiando, además, a las futuras investigaciones que tendrán ya identificados los precursores químicos, para posteriormente optimizar este proceso y hacerlo cada vez más aprovechable. En el largo plazo el país podría verse beneficiado con insumos químicos locales, que permitan reducir las importaciones en este contexto. Así como, posicionar a los desechos plásticos como una materia prima y no como un problema sanitario, sin mencionar las implicaciones positivas en el aspecto económico y laboral que esto acarree.

### **1.3      Objetivos generales y específicos**

#### **1.3.1    Objetivo general**

- Diseñar y simular una torre de fraccionamiento del producto líquido de pirolisis del polipropileno, para identificar los precursores químicos.

#### **1.3.2    Objetivos específicos**

- Analizar los criterios que conllevan la identificación de precursores químicos, en el contexto de la determinación del número de unidades de transferencia de la columna de fraccionamiento.
- Sintetizar el estado del arte con relación a la identificación de precursores químicos que conllevan la determinación de la curva de equilibrio; según los resultados de cromatografía de la fracción líquida de la pirolisis catalítica del polipropileno.
- Determinar las condiciones óptimas de fraccionamiento de la alimentación empleando el software DWSIM, como herramienta de simulación en la identificación de precursores químicos.
- Validar el diseño propuesto comparando teóricamente la fracción molar por componente con resultados de investigaciones análogas, así como el error relativo obtenido a partir de la simulación de la torre de fraccionamiento con el software DWSIM

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1 Antecedentes de la Investigación

Debido a que el plástico proveniente del polipropileno es utilizado ampliamente por la población mundial, en gran parte por sus características excelentes, bajo costo y múltiples beneficios; esto ha generado una amenaza al medio ambiente, ya que la degradación del plástico naturalmente requiere de muchos años.

(Segura, 2015). Indica que ciertos plásticos sintéticos son obtenidos mediante fenómenos de polimerización, o multiplicación artificial de los átomos de carbono en largas cadenas moleculares de compuestos orgánicos. En general, son derivados del petróleo, aunque algunos se pueden obtener a partir de otras sustancias naturales. Algunas de las propiedades de estos compuestos que los han hecho tan ampliamente usados son: la facilidad con que pueden ser trabajados o moldeados, su impermeabilidad, su baja densidad (pesan poco con relación a su volumen), su baja conductividad eléctrica, su resistencia a la corrosión y a la intemperie, su resistencia a diversos factores químicos, biológicos y su bajo costo.

Sin embargo, algunas de estas propiedades, que son favorables desde el punto de vista de las aplicaciones que los plásticos pueden tener, han resultado inconvenientes para el manejo de los desechos que se generan con el uso creciente de estos materiales.

(Rahimi & Garcíá, 2017). La generación mundial de desechos sólidos plásticos aumenta diariamente y actualmente es de alrededor de 150 millones de toneladas por año. Existen tecnologías disponibles para clasificar y reciclar desechos sólidos plásticos en materias primas como; Reciclaje primario y secundario de polímeros comerciales, esto ha involucrado en gran medida a tratamientos térmicos como "derretir y volver a moldear", siendo el método terciario popular el craqueo catalítico térmico de polímeros en combustibles químicos.

La Termólisis de polímeros sobre catalizadores sólidos, a menudo requiere altas temperaturas y ofrece múltiples productos con diversos grados de saturación. Los enfoques de reciclaje tienen limitaciones, como que los materiales solo pueden someterse a un número finito de procesamientos o ciclos, antes de que sus propiedades se vean sustancialmente comprometidas.

El descubrimiento de métodos catalíticos para la química apegada al reciclaje de polímeros, que operan a temperaturas suaves y con altas selectividades, podría ayudar en la recuperación de monómeros a escala industrial.

(J. M. García, 2016). Las técnicas de despolimerización de vanguardia para el polipropileno implican pirólisis sobre catalizadores, para producir productos que contienen de tres a siete carbonos con diferentes niveles de saturación para ser utilizados como combustible. Aún no se han desarrollado catalizadores para apuntar a la regeneración de propileno selectiva y limpia.

(Pérez et al., 2017). El agrietamiento catalítico es más atractivo que la degradación térmica por sí sola, ya que es más rápido y requiere temperaturas más bajas, lo que reduce significativamente la demanda de energía. Además, El craqueo catalítico que utiliza catalizadores como zeolitas da como resultado productos de alta calidad en la gama de motores y combustibles para motores, lo que reduce la necesidad de actualizaciones adicionales. La pirólisis térmica está más restringida a áreas de las refinerías de petróleo existentes ya que sus productos requieren más mejoras.

(Ahmad et al., 2015). La pirólisis de polipropileno (PP) y polietileno de alta densidad (HDPE) en productos similares a combustibles en un rango de temperatura de 250 a 400 ° C, obtuvieron que las fracciones líquidas mediante FTIR y GC-MS mostraron una amplia gama de hidrocarburos distribuidos principalmente dentro del C 6 -C 16, en el caso del PP está enriquecido en hidrocarburos de la gama nafta gasolina y Diesel.

El porcentaje de hidrocarburos parafínicos, olefínicos y nafténicos en el producto líquido derivado del PP es 66.55, 25.7 y 7.58%, respectivamente, indicando que las fracciones líquidas derivadas eran similares al combustible y cumplían con los criterios de grado de combustible.

## **2.2 Bases Teóricas**

### **2.2.1 Plástico**

Se producen mediante la conversión de componentes básicos de hidrocarburos, como el metano y el etano, en cadenas largas con moléculas repetidas llamadas polímeros. Los polímeros o plásticos están hechos de la combinación de miles de unidades más pequeñas conocidas como monómeros. Este proceso de combinación se realiza utilizando un proceso llamado polimerización, que es un proceso químico en el que los monómeros se combinan entre sí para formar largas cadenas moleculares llamadas polímeros (Ilbay, 2015).



**Figura 1-2:** Código de identificación de resinas de plástico.

Fuente:(Rodríguez, 2015)

### 2.2.2 Clasificación de los plásticos

El plástico se puede clasificar según el tipo de síntesis, tipo de enlace molecular, componentes químicos, etc. Por lo general se lo suele clasificar por su respuesta térmica y mecánica, cuyo resultado depende de lo mencionado anteriormente. se lo clasifica en:

- **Termoplásticos.** - Son aquellas largas cadenas poliméricas lineales relativamente sin enlaces cruzados resultado de la polimerización de monómeros con comportamientos elásticos y dúctiles, es decir que tienen la capacidad de formar filamentos delgados como hilos. Al someterlos a elevada temperatura pierden dichas propiedades convirtiéndose en un fluido espeso, que se recupera al enfriarlo pudiendo repetir el proceso varias veces. Se lo utiliza comúnmente para almacenar alimentos y son muy fáciles de recuperar.

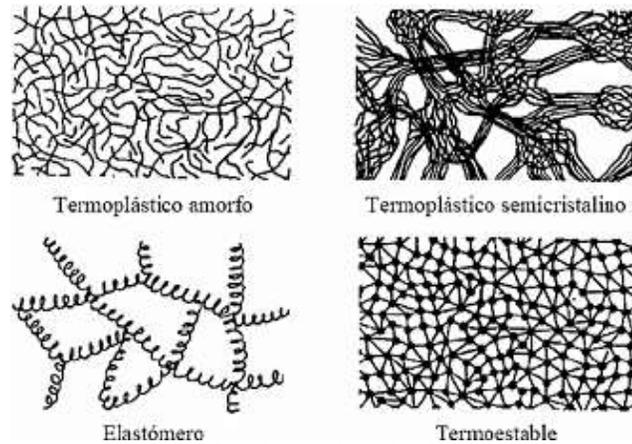
- **Elastómeros.** - Son polímeros generalmente constituidos por macromoléculas entrecruzadas ligeramente, con propiedades altamente elásticas a tal punto que pueden recuperar su estado original una y otra vez sin efectos en su estructura. No sufre cambios a elevadas temperaturas sino hasta el punto de descomposición química en el cual se transforma en un fluido, además son insolubles en agua con un alto poder de absorción.

A este grupo pertenecen los:

- a) Cauchos
- b) Gomas
- c) Látex
- d) Poli isopreno

- **Termoestables.** - Un polímero termoestable está constituido por moléculas lineales, las cuales al someterse a elevadas temperaturas forman una secuencia de enlaces cruzados que al enfriarse se transforman en sustancias rígidas, duras, con elevada resistencia térmica pero muy frágiles. Uno de los inconvenientes más notables es su dificultad para la recuperación de sus residuos. (Ilbay, 2015).

- a) Las resinas
- b) Plásticos de fenol-formaldehído



**Figura 2-2:** Clasificación de los plásticos.

Fuente: (Rodríguez, 2015)

### 2.2.3 Polipropileno

Es un polímero termoplástico que pertenece a la familia de las poliolefinas. Se produce a través de la polimerización del propileno, un subproducto gaseoso de la refinación del petróleo, en presencia de un catalizador estereoespecífico, a una temperatura dada y una presión cuidadosamente controladas. El PP se produce comercialmente en distintas formas, dependiendo de las propiedades deseadas. El homopolímero de PP contiene únicamente el monómero propileno en la cadena polimérica. Proporciona rigidez y tenacidad, pero muestra una pobre resistencia al impacto a bajas temperaturas y una claridad muy baja para algunas aplicaciones. Sus principales aplicaciones son: alfombras, pañales desechables, interiores de automóviles, electrodomésticos, contenedores, muebles y juguetes. (Torres, 2012).

#### 2.2.3.1 Propiedades polipropileno

El polipropileno tiene propiedades físicas, mecánicas y térmicas excelentes y deseables cuando se usa en aplicaciones a temperatura ambiente. Es relativamente rígido y tiene un alto punto de fusión, baja densidad y tiene relativamente una buena resistencia al impacto. Se presentan

propiedades que identifican al polipropileno según el Instituto mexicano del plástico industrial (1997):

- a) Su elevado punto de fusión de 175°C proporciona una mejor resistencia térmica, que permite su uso en productos que requieren esterilización o pasteurización por calor como lo son las jeringas desechables o envases para alimentos.
- b) Presenta una densidad menor del rango de 0.89 a 0.91 g/cm<sup>3</sup>.
- c) Presenta excelente resistencia química ya que puede ser ligeramente atacado por algunos hidrocarburos no polares.
- d) Es sensible a la degradación por oxidación con calor o radiación UV, pero puede protegerse con aditivos adecuados.
- e) Presenta una moderada rigidez y tenacidad por lo que se clasifica como un plástico semirrígido.
- f) Su resistencia a la abrasión es particularmente buena en comparación con el Polietileno.

Estas propiedades pueden variar de una manera relativamente simple al alterar el contenido y la distribución de la regularidad (táctica) de la cadena, las longitudes promedio de las cadenas, la incorporación de un comonomero como el etileno en las cadenas de polímeros y la incorporación de un modificador de impacto en la formulación de resina. (William J. Kissel , J. Han, 2004).

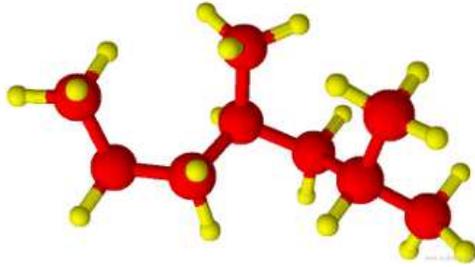
**Tabla 1-2:** Propiedades Físico – químicas del polipropileno.

Polímero	Polipropileno
Símbolo	PP
Método de síntesis	Polimerización por adición
Elasticidad	200,000lb/pulg <sup>2</sup> (1400 MPa)
Tensión	5000 lb/pulg <sup>2</sup> (35Mpa)
Gravedad especifica	0,9
Temperatura de tránsito vítrea	20°C
Temperatura de fusión	175°C
Densidad	0.89 a 0.91 g/cm <sup>3</sup>

Fuente: (William J. Kissel , J. Han, 2004)

Elaborador por: Johana Orna

### 2.2.3.2 Estructura y morfología del polipropileno.

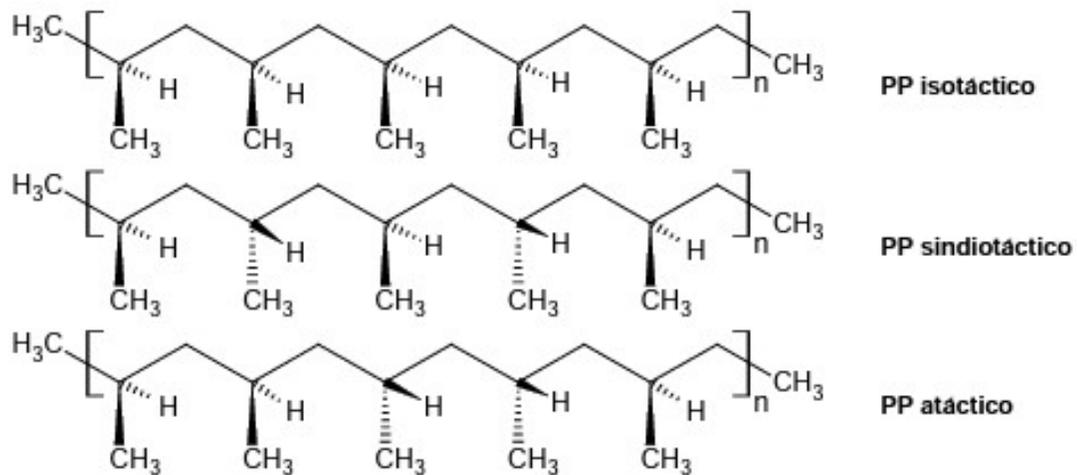


**Figura 3-2:** Estructura 3D del pp. Color rojo (C) Y color amarillo (H)

Fuente: (Monzó Pérez, 2015)

El polipropileno (PP) es una macromolécula lineal producida al disociar dobles enlaces entre dos átomos de carbono de monómero de propileno asimétrico a la cadena primaria. La característica está determinada por el tipo de técnica de polimerización, condiciones, y principalmente por el sistema del catalizador utilizado. Los tipos de catalizadores, así como el apoyo del catalizador y los donantes externos e internos, afectan la composición e, incluso más, la configuración de la macromolécula.

En el caso de PP, diferentes configuraciones (tacticidad) de los grupos metilo a lo largo del esqueleto de la cadena principal son posibles debido al asimétrico monómero de propileno. Se denomina PP isotáctico (iPP), cuando los grupos metilo están dispuestos en equilátero, es PP sindiotáctico (sPP), cuando los grupos metilo están dispuestos alternativamente, y cuando no hay orden, hablamos de PP atáctico (aPP). (Stern, 2005).

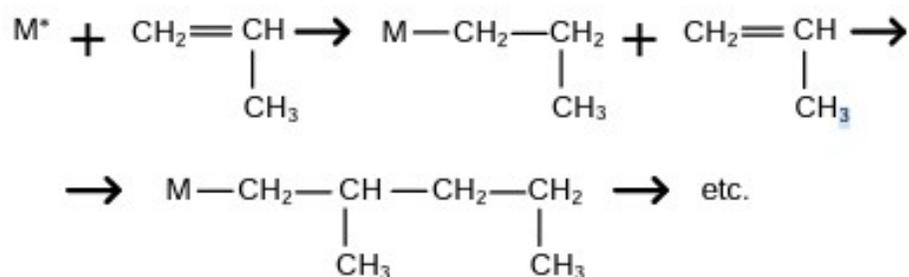


**Figura 4-2:** Estereoisómeros de polipropileno.

Fuente: (Monzó Pérez, 2015)

En la reacción de polimerización muchas moléculas de propileno (monómero) reaccionan para formar una gran molécula de polipropileno (Figura 2). La síntesis de este polímero requiere la utilización de un catalizador, generalmente un compuesto organometálico donde el centro activo es un metal de transición.

El catalizador actúa como soporte para que la reacción de polimerización tenga lugar, las moléculas de propeno se unen de forma secuencial a la cadena polimérica introduciéndose en la posición inicial entre el metal de transición y el enlace con la primera unidad monomérica de la cadena polimérica.



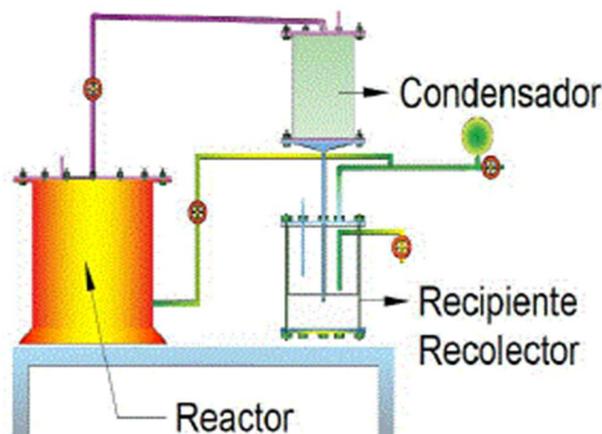
**Figura 5-2:** Mecanismo de polimerización del polipropileno.  
Fuente: (Monzó Pérez, 2015)

#### 2.2.4 Pirólisis

Es un proceso térmico en el que los materiales de la materia prima se descomponen en una atmósfera no oxidante. Dependiendo de las propiedades del material y condiciones de calentamiento, cuando el material se calienta, puede sufrir cambios físicos (por ejemplo, deformación, fusión) y cambios químicos, es decir, ruptura de enlaces químicos. (Gao, 2010).

Los enlaces rotos generan radicales que pueden propagarse en la estructura química y recombinarse con otros radicales. A medida que se aplica más calor, se rompen más enlaces, y tan pronto como los productos son lo suficientemente pequeños, se evaporan y dejan la masa material detrás como un residuo sólido.

Los productos volatilizados pueden descomponerse aún más, debido al calor o reaccionar con otros productos, lo que resulta en la formación de una amplia gama de compuestos. Algunos de estos compuestos se pueden condensar en productos líquidos y algunos son gases permanentes. Los productos finales son entonces el residuo sólido o carbón, líquidos y gases (Sophonrat, 2019).



**Figura 6-2:** Esquema de la pirólisis.  
**Fuente:** (Rejas, Carreón, Ortiz, Llanes, & Copa, 2015)

### 2.2.5 *Productos de pirólisis*

Los principales productos de salida son las fracciones de hidrocarburos gaseosos y líquidos que son notablemente similares a los productos de craqueo de la refinería. Su composición química y sus propiedades dependen en gran medida a la composición de la carga de entrada.



**Figura 7-2:** Productos de la obtención de la pirólisis.  
**Fuente:** (Taipe, 2020)

El proceso de pirólisis catalítica se caracteriza por el alto rendimiento de combustible líquido, mientras que los rendimientos de residuos sólidos y gaseosos no condensables son inferiores respecto a la pirólisis térmica. El proceso convierte los plásticos de desecho mediante pirólisis catalítica a 270–370 ° C en presencia de un catalizador de intercambio iónico (descrito como un catalizador de zeolita de aluminosilicato de sodio y altamente cristalino). La composición de los productos finales de la despolimerización catalítica que describe Scheirs & Kaminsky (2006) son:

- Combustible líquido (diésel) 93–95%
- Gas no condicional 4–5%.
- Residuos sólidos <1%

La producción de gasolina, queroseno y diésel a partir de desechos plásticos es una solución tecnológica emergente ante la gran cantidad de plásticos, que no pueden ser recuperados económicamente por el reciclaje mecánico convencional.

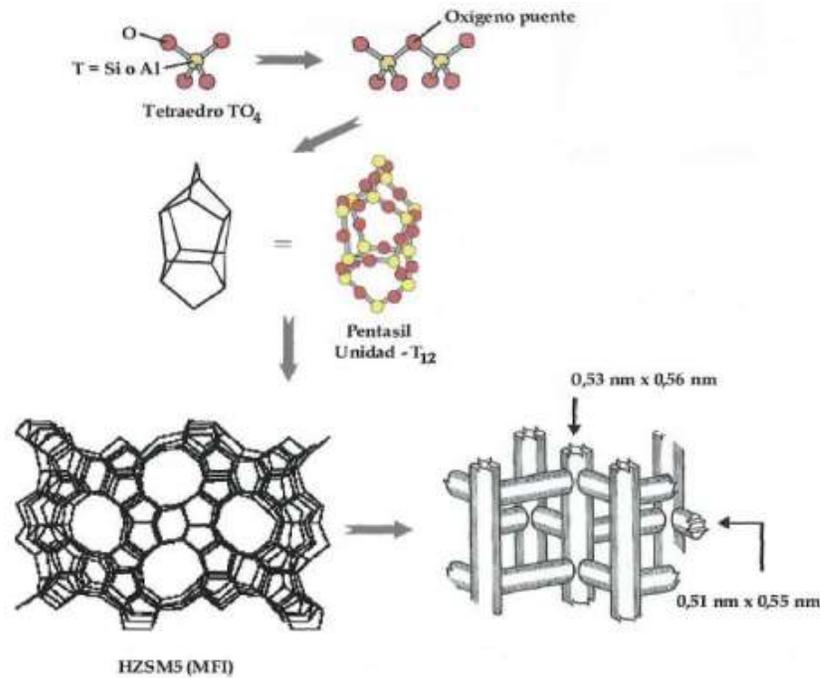
## **2.2.6 Tipos de pirólisis**

### *2.2.6.1 Pirólisis térmica*

En esta la temperatura es el valor determinante, pues no se agrega ningún acelerador de reacción que interfiera. Es un proceso endotérmico ( $\Delta H = 46.1 \text{ MJ/kg}$ ) que se ha realizado con anterioridad en materiales como el caucho, el poliestireno, polipropileno y polietileno; en todos ellos se ha evidenciado que la temperatura óptima varía de acuerdo a la materia prima. Todos los procesos de pirólisis térmica se encuentran entre 300 y 900 °C; de modo que se ha registrado que a bajas temperaturas (menores a 500°C) se favorece la producción de aceite por tratarse de una pirólisis lenta, mientras que a altas temperaturas (mayores a 600°C) la pirólisis rápida favorece la formación de gases. Otros factores a tener en cuenta en el proceso de reciclaje químico por pirólisis térmica son la composición de la materia prima, la presión y el tiempo de residencia, siendo estos dos últimos dependientes de la temperatura.

### *2.2.6.2 Pirólisis catalítica*

Este método de reciclaje es similar a la pirólisis térmica con la única diferencia de que en este caso se agrega un catalizador al proceso, el cual es una sustancia que permite reducir la temperatura de craqueo, aumentar el rendimiento de productos gaseosos mediante el incremento de la selectividad, disminuir las reacciones secundarias y reducir la energía de activación del proceso. El catalizador más utilizado son las zeolitas porque son compuestos ricos en aluminosilicatos caracterizados por su alta cristalinidad y área superficial, aunque la roca volcánica o riolita también es uno de los materiales más comunes en estos procesos ya que, por su origen, resiste altas temperaturas y su composición es muy similar a la de una zeolita .



**Figura 8-2:** Estructura esquemática de la zeolita.  
Fuente: (Zavala, 2015)

El mecanismo de reacción de craqueo térmico se caracteriza porque al romperse los enlaces por efectos del calor, las moléculas quedan con radicales libres que las dejan inestables y por lo tanto buscan estabilidad uniéndose con otras o creando dobles enlaces, formando así moléculas de cadenas más pequeñas. En estudios previos se ha evidenciado que la pirólisis catalítica, en comparación con la térmica, aumenta el rendimiento de aceite pirolítico y gases incondensables. Además, permite obtener aceites de mejor calidad a menores temperaturas y tiempos de reacción como consecuencia de las reacciones irreversibles que se dan en el proceso, pues la interacción entre las moléculas de polímeros hidrocarbonados y las del catalizador no sólo favorece la generación de moléculas pequeñas, sino que también fomenta la formación de hidrocarburos ramificados.

Para la pirólisis catalítica la formación de compuestos varía ligeramente debido a la interacción de las moléculas hidrocarbonadas con el catalizador, inicialmente se rompe un enlace de la poliolefina por efectos del calor y el electrón liberado en este proceso es atraído por un protón del catalizador, dejando al hidrocarburo con una carga positiva. Como la molécula hidrocarbonada está inestable, esta se rompe generando una molécula de cadena más corta. (Torres Moreno & Castañeda Sáenz, 2018).

### 2.2.7 Cromatografía

Actualmente cromatografía es el nombre que se le da a un grupo de técnicas utilizadas en la determinación de la identidad de sustancias, en la separación de componentes de las mezclas y en la purificación de compuestos. Esta técnica es muy efectiva y por lo tanto se utiliza tanto a nivel de investigación como a nivel industrial. Este método puede variar de técnica en técnica, pero siempre se basa en el mismo principio: Todos los sistemas de cromatografía contienen una fase estacionaria y una fase móvil.

La cromatografía es esencialmente un método de separación en el que los componentes a separar se distribuyen entre dos fases, una inmóvil (fase estacionaria), y otra móvil (fase móvil) la cual percola a través de la primera. El proceso cromatográfico se da como resultado de repetidos procesos de sorción-desorción durante el movimiento de los componentes de la mezcla arrastrados por la fase móvil a lo largo de la fase estacionario, produciéndose la separación debido a las diferencias en las constantes de distribución de los componentes de la mezcla entre la fase estacionaria y la móvil.

A la distribución final de los componentes en función de su posición sobre el lecho estacionario, o del tiempo en que eluyen se le denomina cromatograma. La fase estacionaria puede ser un sólido o un líquido que se queda fijo en la misma posición. La fase móvil puede ser un líquido o un gas que corre a través de una superficie y de la fase estacionaria. Las sustancias que están en un sistema de cromatografía interactúan tanto con la fase estacionaria como con la fase móvil. La naturaleza de estas interacciones depende de las propiedades de las sustancias, así como también de la composición de la fase estacionaria. La rapidez con que viaja una sustancia a través del sistema de cromatografía depende directamente de la interacción relativa entre las sustancias y las fases móvil y estacionaria. En el caso de una mezcla, si cada componente interactúa diferente con la fase móvil y la fase estacionaria, cada uno de ellos se moverá diferente. (Pássaro et al., 2016).

**Tabla 2-2:** Técnicas de cromatografía.

<b>Técnica</b>	<b>Fase móvil</b>	<b>Fase estacionaria</b>
Cromatografía de gases	Gas	Sólido o Líquido
Cromatografía líquida F. inversa	Líquido(Polar)	Sólido o Líquido
Cromatografía líquida F. normal	Líquido (menos polar)	Sólido o Líquido (polar)
Cromatografía líquida intercambio Iónico	Líquido(Polar)	Sólido
Cromatografía líquida de exclusión	Líquido	Sólido
Cromatografía líquida de adsorción	Líquido	Sólido

Fuente: (Pássaro et al., 2016).

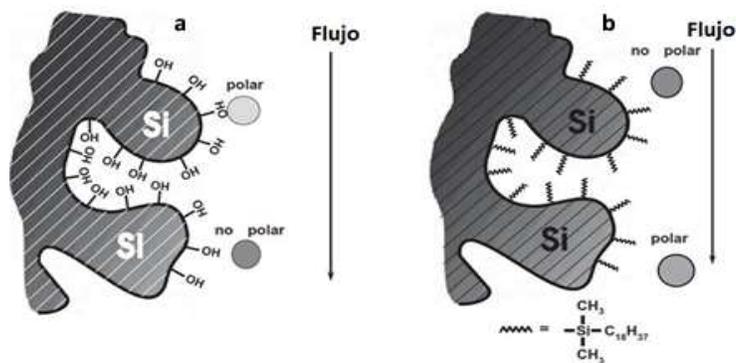
Elaborador por: (Pássaro et al., 2016).

### 2.2.7.1 Tipos de cromatografía

Se clasifican según el tipo general de interacción que se produce entre la fase estacionaria y los solutos en el eluyente.

- **Cromatografía en fase normal.** - Esta se realiza sobre fases estacionarias hidrofílicas como la sílice o alúmina microporosas y con solventes de mediana a baja polaridad como fase móvil. Es un método apropiado para la separación de solutos de polaridad mediana a alta y es de suma utilidad para la separación de isómeros posicionales con sustituyentes polares.

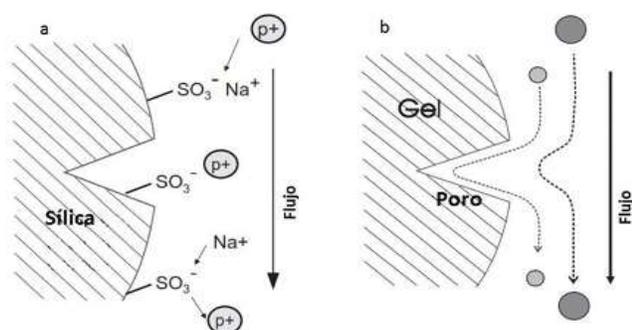
- **Cromatografía en fase reversa.** - En esta cromatografía la fase estacionaria es menos polar que la fase móvil. Se emplean dos tipos fundamentales de fases estacionarias y las más comunes son grupos no polares enlazados con la sílica. Entre los más utilizados son los grupos orgánicos, de este modo los solutos se reparten entre el recubrimiento superficial y la fase móvil a semejanza de una extracción líquido-líquido



**Figura 9-2:** a) Cromatografía fase normal y b) Cromatografía fase reversa.  
Fuente: (Pássaro et al., 2016)

- **Cromatografía de intercambio iónico.** - En este tipo se utilizan fases estacionarias que tienen cargas enlazadas a las que se les denomina de intercambio iónico. Las fases estacionarias formadas por polímeros entrecruzados con cargas negativas fijas se intercambian con iones positivos, llamándose resinas de intercambio catiónico; y los polímeros con cargas positivas enlazadas covalentemente sobre ellos intercambian iones negativos y se llaman resinas de intercambio aniónico.

- **Cromatografía de líquidos por filtración en gel o exclusión.** - La separación se basa en el tamaño de las moléculas. La fase estacionaria que se emplea es un sólido con poros de corte transversal controlado (con todo el cuidado y precisión posibles). La permeación se produce a través de los poros de las partículas empacadas en las columnas. La separación se produce porque sólo las partículas más pequeñas penetran a los poros y son removidas de la fase móvil que fluye. De este modo las moléculas mayores se eluyen en primer lugar, seguidas por las más pequeñas (Pássaro et al., 2016).



**Figura 10-2:** a) Cromatografía iónica y b) Cromatografía de exclusión.  
 Fuente: (Pássaro et al., 2016)

## 2.2.8 Tipos de destilación

### 2.2.8.1 Destilación Simple

La destilación simple es utilizada en mezclas líquidas que contengan una sustancia volátil, o bien, si existen dos sustancias volátiles separadas por al menos 80 °C de su punto de ebullición. El resultado de esta destilación es un producto con una concentración mayor de la sustancia más volátil que el resto.

### 2.2.8.2 Destilación simple a presión atmosférica

La destilación a presión atmosférica es una operación que se realiza a una presión igual a la ambiental o de la región en la que se realice el trabajo. Su principal uso se da cuando la temperatura del punto de ebullición del compuesto más volátil se encuentra por debajo de la temperatura de descomposición química. Esta destilación se emplea cuando las sustancias a separar presentan puntos de ebullición por debajo de los 500 °C o 400°C ya que, a partir de ese punto, la cantidad de energía necesaria para alimentar el sistema se incrementa, lo que aumentaría los costos de producción.

### *2.2.8.3 Destilación simple a presión reducida*

La destilación a presión reducida o al vacío consiste en eliminar el aire de la recámara de la torre de destilación con la finalidad disminuir la presión de trabajo, y con ello, reducir el punto de ebullición del componente más pesado que se pretende separar. Debido a que la presión es directamente proporcional a la temperatura, si se reduce la presión de trabajo, entonces se estará reduciendo la temperatura o el calor necesario para separar un componente. Esta destilación es utilizada cuando el punto de ebullición del compuesto a purificar es superior a la temperatura de descomposición química del producto.

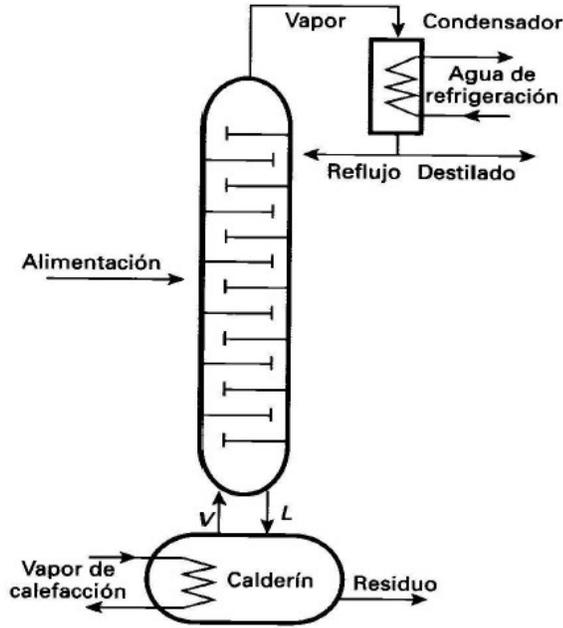
### *2.2.8.4 Destilación por arrastre de vapor*

La destilación por arrastre de vapor es utilizada en la purificación o en el aislamiento de componentes con puntos de ebullición muy elevados, empleando una destilación a baja temperatura (por debajo de los 100 °C). Esta destilación resulta útil cuando las sustancias poseen puntos de ebullición superiores a los 100 °C, debido a que se descomponen antes o al alcanzar la temperatura de su punto de ebullición. Este proceso permite separar sustancias insolubles entre sí y otros componentes ligeramente volátiles de otros no volátiles. Consiste en adicionar exceso de agua a la mezcla que se desea separar para que el componente de mayor volatilidad sea recuperado con el agua similar a un proceso de extracción líquido-vapor (Herrera, 2018).

### *2.2.8.5 Destilación fraccionaria*

Es un proceso físico utilizado en química para separar mezclas de líquidos mediante el calor, con un amplio intercambio calórico y másico entre vapores y líquidos. Se emplea principalmente cuando es necesario separar compuestos de sustancias con puntos de ebullición distintos pero cercanos. Algunos de los ejemplos más comunes son el petróleo, y la producción de etanol.

Destilación fraccionaria, permite un mayor contacto entre los vapores que ascienden con el líquido condensado que desciende, por la utilización de diferentes "platos" (placas). Esto facilita el intercambio de calor entre los vapores (que ceden) y los líquidos (que reciben). Ese intercambio produce un intercambio de masa, donde los líquidos con menor punto de ebullición se convierten en vapor, y los vapores de sustancias con mayor punto de ebullición pasan al estado líquido.



**Figura 11-2:** Destilación fraccionaria.  
Fuente: (García, Rodríguez, & Solís, 2013).

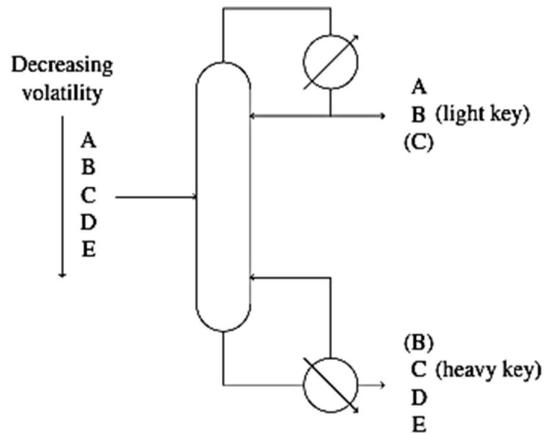
Mientras la mezcla hierve(alimentación), el vapor producido asciende por la columna, se va condensando en las sucesivas placas y vuelve a caer hacia el líquido, produciendo un reflujo destilado. La columna se calienta desde abajo y, por tanto, la placa más caliente está en la parte inferior, y la más fría en la superior. En condiciones estables, el vapor y el líquido de cada placa están en equilibrio y solamente los vapores más volátiles llegan a la parte superior en estado gaseoso.

Este vapor pasa al condensador, que lo enfría y lo dirige hacia otro recipiente, donde se licúa de nuevo. Se consigue un destilado más puro en cuanto más placas de vidrio haya en la columna. La parte condensada en la placa más cercana al azeótropo contiene gradualmente menos etanol y más agua, hasta que todo el etanol queda separado de la mezcla inicial. Este punto se puede reconocer mediante el termómetro ya que la temperatura se elevará bruscamente. (Acuña, 2010).

### 2.2.9 Destilación de mezclas de multicomponentes

En la industria, muchos de los procesos de destilación incluyen la separación de más de dos componentes. Los principios generales del diseño de las torres de destilación de multicomponentes son iguales en muchos aspectos a los que se describieron para los sistemas binarios. Se tiene un balance de masa para cada componente de la mezcla de multicomponentes. Los balances de entalpía o calor que se realizan son muy semejantes a los del caso binario. -Los

datos de equilibrio se usan para calcular los puntos de ebullición y de rocío, y también se utilizan los conceptos de reflujo mínimo y reflujo total como casos limitantes.



**Figura 12-2:** Destilación multicomponente.  
Fuente: (Rodgers, 2019)

#### 2.2.9.1 Métodos de cálculo del diseño

En la destilación de multicomponentes, como en la binaria, se suponen etapas o platos ideales para los cálculos etapa por etapa. Usando los datos de equilibrio, los cálculos de equilibrio se emplean para obtener el punto de ebullición y la composición del vapor en equilibrio a partir del líquido, o el punto de rocío y dicha composición a partir de una composición dada del vapor. Estos cálculos de diseño de etapa por etapa implican cálculos de prueba y error, y generalmente se emplean computadoras digitales de alta velocidad para proporcionar soluciones rigurosas. En un diseño, las condiciones de la alimentación generalmente se conocen o se especifican (temperatura, presión, composición).

Por lo tanto, en la mayoría de los casos el procedimiento de cálculo procede según uno de dos métodos generales. En el primer método se especifica la separación deseada entre dos de los componentes y se calcula el número de platos teóricos para una razón determinada de reflujo. Es claro que con más de dos componentes en la alimentación no se conocerán las composiciones completas del destilado y del residuo, y se tendrán que usar procedimientos de prueba y error, y generalmente se emplean computadoras digitales de alta velocidad para proporcionar soluciones rigurosas. (C.J.Geankoplis, 1998).

### 2.2.9.2 Equilibrios entre fases para la destilación multicomponente

Los equilibrios vapor-líquido para una mezcla están descritos por los coeficientes de distribución, o factores K, siendo K para cada componente la relación entre las fracciones molares de las fases de vapor y líquido en equilibrio:

$$K_i = \frac{y_{ie}}{X_{ie}} \quad (2.1)$$

Si las leyes de Raoult y Dalton son aplicables, es posible calcular los valores de  $K_i$  a partir de la presión de vapor y la presión total del sistema:

$$P_i = X_i p_i' \quad (2.2)$$

$$y_i = \frac{p_i}{p} \quad (2.3)$$

$$K_i = \frac{p_i'}{p} \quad (2.4)$$

La ley de Raoult es una buena aproximación para mezclas de compuestos similares, como las parafinas que se encuentran en fracciones de petróleo de baja temperatura de ebullición o de aromáticos recuperados a partir de la producción de coque. Sin embargo, a presiones elevadas, los factores K no varían de forma inversamente proporcional con la presión total debido a los efectos de compresibilidad. Los factores K dependen fuertemente de la temperatura debido a la variación de la presión de vapor, pero los valores relativos de K para dos componentes sólo varían moderadamente con la temperatura. La relación de los factores K es la misma que la volatilidad relativa de los componentes:

$$\alpha_{ij} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} = \frac{K_i}{K_j} \quad (2.5)$$

Donde:

$\alpha_{ij}$  = volatilidad relativa de todos los componentes de la mezcla orgánica.

$K_j$  = el componente de referencia (el componente más pesado de la mezcla orgánica).

Cuando se aplica la ley de Raoult,

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'} \quad (2.6)$$

La volatilidad relativa media de un componente clave en el producto destilado con relación a la de un componente clave en el producto residual se utiliza para estimar el número mínimo de etapas en una destilación multicomponente. Las presiones parciales son calculadas en base a la ecuación de Antoine, definida A, B y C son parámetros característicos para cada compuesto. (Montoya, 2012).

$$\log(p') = A - \frac{B}{T + C} \quad (2.7)$$

Donde:

P = presión de funcionamiento del sistema en mmHg.

T = temperatura aproximada (temperatura de burbuja o punto de rocío) en °K.

A, B y C = Constantes de Antoine a temperatura y presión fijas para los componentes respectivos.

### 2.2.9.3 Cálculo del punto de burbuja y del punto de rocío

La determinación de la temperatura de burbuja (temperatura inicial de ebullición de una mezcla líquida) o de la temperatura de rocío (temperatura inicial de condensación) es necesaria para el cálculo de una destilación súbita (flash) y para cada una de las etapas de una destilación multicomponente. Las ecuaciones básicas para la temperatura de burbuja son las siguientes: La determinación de la temperatura de burbuja (temperatura inicial de ebullición de una mezcla líquida) o de la temperatura de rocío (temperatura inicial de condensación) es necesaria para el cálculo de una destilación súbita (flash) y para cada una de las etapas de una destilación multicomponente. Las ecuaciones básicas para la temperatura de burbuja son las siguientes:

$$\sum_{i=1}^{N_0} y_i = \sum_{i=1}^{N_0} K_i x_i = 1 \quad (2.8)$$

y para la temperatura de rocío,

$$\sum_{i=1}^{N_0} x_i = \sum_{i=1}^{N_0} \frac{y_i}{K_i} = 1 \quad (2.9)$$

Donde:

$N_0$  es el número de componentes.

Para utilizar la ecuación (2.7), se supone un valor de la temperatura y los valores de  $K_i$  se obtienen a partir de tablas publicadas o de los datos de la presión de vapor y de la presión total conocida.

#### 2.2.9.4 Componentes clave

En la destilación multicomponente, hay tres o más componentes en los productos, y las especificaciones de las concentraciones de un componente en cada uno de ellos no caracteriza totalmente estos productos. Sin embargo, si se especifican las concentraciones de dos de los tres o tres de los cuatro componentes para los productos de destilado y residuo, generalmente es imposible cumplir exactamente estas especificaciones.

Un aumento en la relación de reflujo o del número de platos aumenta la velocidad de la separación y se alcanza la concentración deseada de un componente en cada producto, pero sería una casualidad que las demás concentraciones coincidieran con las especificadas de antemano. El diseñador por lo general elige dos componentes cuyas concentraciones o recuperaciones fraccionales en los productos de destilado y residuo constituyen un buen índice de la separación conseguida. Después se identifican estos componentes, llamados componentes clave. Puesto que los componentes clave tienen diferente volatilidad, el más volátil, identificado por el subíndice L, recibe el nombre de clave ligero, y el menos volátil, identificado por el subíndice H, es el clave pesado.

Una vez elegidos los componentes clave, el diseñador asigna arbitrariamente valores bajos para  $x_H$  en el destilado ( $x_{DH}$ ) y para  $x_L$  en el residuo ( $x_{BL}$ ), de la misma forma en que se asignan valores pequeños para  $x_{DB}$  y  $x_{BA}$  en la destilación binaria. La elección de pequeños valores para  $x_{BL}$  y  $x_{DH}$  quiere decir que la mayor parte del clave ligero sale del destilado mientras que la mayor proporción del clave pesado lo hace con el residuo.

El destilado puede ser el clave ligero prácticamente puro si los claves son los dos componentes más volátiles, ya que los componentes más pesados que el clave pesado tenderán a concentrarse en la fase líquida y no ascenderán mucho por encima del plato de alimentación. Con frecuencia hay componentes más ligeros que el clave ligero y éstos se recuperan casi por completo en el destilado. Los componentes más pesados que el clave pesado por lo general se recuperan totalmente en el producto residual. (Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot, 2013).

### 2.2.9.5 Método de Fenske, Underwood y Gilliland (FUG)

Desarrollado para mezclas multicomponente, es uno de los más conocidos y utilizados debido a la facilidad de su cálculo con ecuaciones lineales. Este método está conformado por ecuaciones de Fenske que establece el reflujo total, la ecuación de Underwood que calcula el reflujo mínimo y la correlación de Gilliland que analiza el desempeño de las torres reales en condiciones de reflujo mínimo y total para proporcionar el número de etapas reales, así como el reflujo real de la torre. En este método se presenta un algoritmo de resolución el que se especifica la alimentación, distribución de los componentes livianos y pesados, para posteriormente establecer la distribución de los componentes a lo largo de la columna, la presión de la columna y los equilibrios de cada etapa. Posterior a ello se calcula el reflujo mínimo a infinito número de etapas hasta determinar el número de etapas dadas por el reflujo mínimo (Herrera, 2018).

- **Numero de etapas mínimas.** - Etapas mínimas para el reflujo total, Al igual que en la destilación binaria, el número mínimo de etapas teóricas  $N_m$ , se puede determinar para la destilación de multicomponentes para el reflujo total. La ecuación de Fenske (II .4-23) también se aplica a dos componentes cualesquiera en un sistema de multicomponentes. Cuando se aplica a la fase pesada H y a la fase ligera L, se convierte en:

$$N_m = \frac{\ln \left( \frac{X_{LD} D}{X_{HD} D} \right) \left( \frac{X_{HW} W}{X_{LW} W} \right)}{\ln(\alpha_{Lprom})} \quad (2.10)$$

$$\alpha_{Lprom} = \sqrt{(\alpha_{LD} \alpha_{LW})} \quad (2.11)$$

Donde:

$X_{LD}$  = es la fracción molar de la fase ligera en el destilado.

$X_{LW}$  = es la fracción molar en los fondos.

$X_{HD}$  = es la fracción molar de la fase pesada en el destilado.

$X_{HW}$  = es la fracción molar en el residuo.

$\alpha_{LD}$  = volatilidad relativa a la temperatura superior (punto de rocío).

$\alpha_{LW}$  = volatilidad relativa a la temperatura del residuo.

Es evidente, que la estimación del punto de rocío del destilado y del punto de ebullición del residuo es parcialmente por prueba y error, ya que la distribución de los otros componentes del destilado y del residuo no se conoce y puede afectar estos valores.

**- Plato de alimentación.** - En el plato donde se introduce la alimentación pueden variar la velocidad del líquido o la del vapor, o la de ambos, dependiendo de la condición térmica de la alimentación. Además, algo de vapor se condensa para calentar la alimentación hasta el punto de burbuja; esto da lugar a que el flujo de líquido sea aún mayor en la sección de agotamiento y a que disminuya el flujo de vapor en la sección de rectificación.

Es posible caracterizar los cinco tipos de alimentación utilizando un único factor, representado por  $q$  y definido como los moles de líquido que fluyen en la sección de agotamiento como consecuencia de la introducción de cada mol de alimentación. Por tanto,  $q$  tiene los siguientes límites numéricos para las distintas condiciones:

- *Alimentación fría,  $q > 1$*
- *Alimentación en el punto de burbuja (líquido saturado),  $q = 1$*
- *Alimentación parcialmente como vapor,  $0 < q < 1$*
- *Alimentación en el punto de rocío (vapor saturado),  $q = 0$*
- *Alimentación como vapor sobrecalentado,  $q < 0$*

Si la alimentación es una mezcla de líquido y vapor,  $q$  es la fracción de líquido. Tal alimentación puede producirse por una evaporación instantánea (o flash) de equilibrio, de forma que  $q = 1 - f$ , donde  $f$  es la fracción de la corriente original vaporizada en el flash (Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot, 2013). Una aproximación razonablemente buena de la localización de la etapa óptima de alimentación puede obtenerse utilizando la ecuación empírica de Kirkbride (Sinnott & Towler, 1967).

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{X_{F,HK}}{X_{FLK}} \right) \left( \frac{X_{w,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \left( \frac{W}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (2.12)$$

Donde:

$N_R$  = Zona de enriquecimiento.

$N_S$  = Zona de agotamiento.

$X_{F,HK}$  = concentración del componente clave pesado en la alimentación

$X_{FLK}$  = concentración del componente clave ligero en la alimentación

$X_{D,HK}$  = es la fracción molar de la fase pesada en el destilado.

$X_{W,LK}$  = es la fracción molar de la fase liviana en el fondo.

- **Método para la razón de reflujo mínimo.** - En la destilación binaria sólo ocurre un “punto pinch” en el cual el número de etapas se vuelve infinito, y esto suele ser el platillo de alimentación. En la destilación de multicomponentes ocurren dos puntos “pinch” o zonas de composición constante: uno en la sección por arriba del plato de alimentación y otro por debajo del mismo. El procedimiento riguroso plato por plato para calcular R, es por prueba y error y puede ser extremadamente tedioso si los cálculos se hacen a mano.

El método corto de Underwood para calcular R, emplea valores a promedio constantes y también supone flujos constantes en ambas secciones de la torre. Este método brinda un valor razonablemente preciso. Las dos ecuaciones para determinar la relación de reflujo mínimo son:

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_i X_{iF}}{\alpha_i - \theta} \quad (2.13)$$

$$R_m + 1 = \sum \frac{\alpha_i X_{iD}}{\alpha_i - \theta} \quad (2.14)$$

Donde:

$\alpha_i$  = volatilidad relativa del componente i con respecto a algún componente diferencial, usualmente el clave pesado.

$X_{iF}$  = concentración del componente i en la alimentación y q depende de la condición de la alimentación.

$R_m + 1$  = relación mínima de reflujo.

$X_{iD}$  = concentración del componente i en el tope a reflujo mínimo.

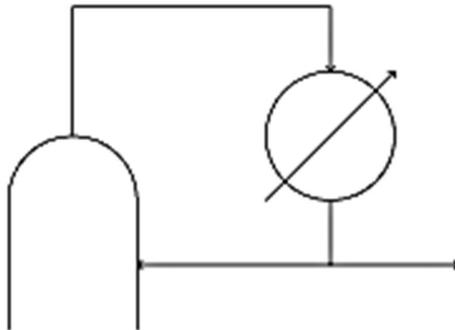
Los valores de  $x_{iD}$  para cada componente del destilado en la ecuación (11.7-20) se supone que son los valores en el reflujo mínimo. Sin embargo, como una aproximación, se utilizan los valores obtenidos mediante la ecuación de reflujo total de Fenske. Como cada  $\alpha_i$  puede variar con la temperatura, el valor promedio de  $\alpha_i$  que se usa en las ecuaciones precedentes se aproxima usando  $\alpha_i$  a la temperatura promedio de la parte superior y del fondo de la torre. Algunos han usado el  $\alpha_i$  promedio empleado en la ecuación de Fenske o el  $\alpha_i$  a la temperatura de la alimentación que

entra. Para despejar  $R_m$ , primero se obtiene el valor de  $\theta$  en la ecuación (2.13) por prueba y error. Este valor de  $\theta$  se encuentra entre el valor  $a$  de la fase ligera y el valor  $a$  de la fase pesada, que es 1.0. Utilizando este valor de  $\theta$  en la ecuación (2.14), se obtiene directamente el valor de  $R_m$ . Cuando aparecen componentes distribuidos entre los componentes fase, se pueden usar los métodos modificados descritos por otros autores (C.J. Geankoplis, 1998).

## 2.2.10 Tipos de Condensadores

### 2.2.10.1 Condensador total

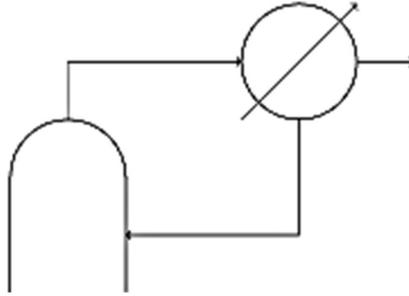
En un condensador total toda la corriente de vapor que abandona la cabeza de la columna se condensa y, posteriormente, se separa en el destilado líquido y el reflujo, que se devuelve a la columna. Sin embargo, en ocasiones, la presión necesaria para condensar toda la corriente de vapor que abandona la cabeza de la columna puede resultar excesiva y se opta por un condensador parcial.



**Figura 13-2:** Condensador Total.  
Fuente: (Rodgers, 2019)

### 2.2.10.2 Condensador parcial

Si se utiliza un condensador parcial, el evaporador sólo se condensa parcialmente. Entonces el vapor y el líquido que salen del condensador están en equilibrio, y el condensador opera como otra etapa de la columna. En este caso el destilado y el reflujo están en equilibrio. Para dibujar la recta operativa de enriquecimiento en el caso de que haya condensador parcial, se procede igual que en el caso de condensador total: a partir del punto de corte con la diagonal y la pendiente o la ordenada en el origen. A efectos gráficos es la misma recta operativa que para condensador total, porque tienen la misma pendiente y el mismo punto de corte con la diagonal. Sin embargo, ahora la primera etapa de equilibrio que se calcula corresponde al condensador total. (Acevedo, 2007).



**Figura 14-2:** Condensador parcial.  
Fuente:(Rodgers, 2019)

## 2.2.11 Factores que afectan la operación de una columna de destilación

### 2.2.11.1 Condiciones del alimento

El estado de la mezcla del alimento y composición del alimento afecta las líneas de operación y el número de fases requerido para la separación. También afecta la localización del plato del alimento. Durante la operación, si las desviaciones de las especificaciones del diseño son excesivas, entonces la columna ya no puede llevar a cabo la tarea de separación. Para superar los problemas asociados con el alimento, algunas columnas se diseñan para tener varias entradas del alimento cuando se espera que el alimento pueda contener varios componentes.

### 2.2.11.2 Condiciones de reflujo

Cuando la razón de reflujo se aumenta, la pendiente de línea de operación para la sección de rectificación se mueve hacia un valor máximo de 1. Físicamente, lo que esto significa es que cada vez más este líquido que es rico en los componentes más volátiles está reciclándose atrasado en la columna. La separación se pone buena entonces y así menos bandejas se necesitan para lograr el mismo grado de separación. Se requieren las bandejas mínimas bajo las condiciones de reflujo totales, es decir no hay ningún retiro de destile. Por otro lado, cuando el reflujo se disminuye, la línea de operación para la sección de la rectificación mueve hacia la línea de equilibrio.

Los apuros entre las líneas de operación y de equilibrio se vuelven más pronunciados y cada vez son más las bandejas requeridas. Esto es fácil de verificar usando el método de McCabe-Thiele. La condición limitante ocurre a la relación de reflujo mínima, cuando se necesitara un número infinito de bandejas para efectuar la separación. La mayoría de las

columnas se diseñan para operar entre 1.2 a 1.5 veces la razón de reflujo mínima porque ésta es aproximadamente la posición de costos de operación mínimos (más reflujo significa tener un reboiler superior).

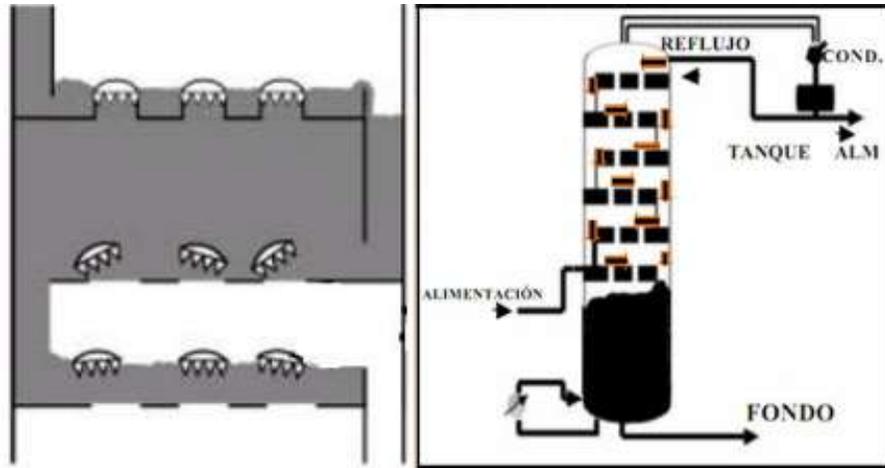
### 2.2.11.3 Condiciones de flujo de vapor

- **Espuma:** se refiere a la expansión de líquido al paso de vapor o gas. Aunque proporciona un alto contacto interfacial líquido-vapor, la espuma excesiva lleva a menudo al aumento de líquido en las bandejas. La aparición de la espuma depende principalmente de las propiedades físicas de las mezclas líquidas, pero a veces son debido a las condiciones de diseño de la bandeja. Cualquiera sea la causa, el poder de separación siempre está reducido.

- **Rebose:** este fenómeno se causa por el bajo flujo del vapor. La presión ejercida por el vapor es insuficiente para sostener el líquido en la bandeja. Por consiguiente, el líquido empieza a gotear a través de las perforaciones.

El rebose excesivo llevará a volcar el líquido. Este líquido en todas las bandejas se chocará (vuelque) regresando a la base de la columna (efecto dominó) y la columna tendrá que ser re-arrancada. El rebose se indica como una gota de presión brusca en la columna y poder de separación reducido.

- **Inundación:** se provoca por el flujo de vapor excesivo. La presión aumentada del vapor excesivo también ayuda al líquido a llegar a la parte baja, mientras va causando un aumento de líquido en el plato. Dependiendo del grado de inundación, la capacidad máxima de la columna puede reducirse severamente. La inundación se descubre por los marcados aumentos en el diferencial de presión de la columna y la disminución significativa en el poder de separación (Ortiz Calderón & Pinzon Castillo, 2007).



**Figura 15-2:** Inundación de un plato en una torre de destilación.  
Fuente: (Helamán & Romero, 2013)

### 2.2.12 Variables de proceso

Son aquellas que definirán el diseño y las condiciones de operación del proceso para el diseño de la torre de destilación fraccionaria, deben tomarse en cuenta todas las variables involucradas, principalmente las de mayor impacto (Helamán & Romero, 2013).

- a) Caudal de destilado.
- b) Relación reflujo/destilado.
- c) Vaporización producida por el fluido calefactor.
- d) Caudal de fondo.
- e) Relación Vaporizado/fondo.
- f) Nivel en fondo de la columna.
- g) Nivel en el acumulador de cabeza.
- h) Composición del componente ligero en cabeza.
- i) Composición del componente ligero en fondo.

La elección de las variables es particularmente importante en la destilación, ya que el problema debe estar lo suficientemente bien definido para encontrar una solución factible cuando se simula usando un ordenador. El número total de variables y ecuaciones requeridas para describir una destilación multicomponente puede ser muy grande, ya que se deben resolver las ecuaciones de MESH para cada etapa, incluyendo la caldera y el condensador. Se hace difícil para el diseñador realizar un seguimiento de todas las variables y ecuaciones, y se pueden tener errores, ya que el número de grados de libertad será la diferencia entre dos números elevados. Sin embargo, se

puede usar un proceso más sencillo conocido como la “norma de descripción” dada por Hanson et al. (1962).

La norma de descripción establece que para determinar un proceso de separación completamente el número de variables independientes que se deben establecer (por el diseñador) será igual al número que se han determinado en la construcción de la columna o que se pueden controlar por medios externos en su operación.

El método se ilustra mejor considerando la operación del tipo más sencillo de columna: con una alimentación, no corrientes laterales, un condensador total y una caldera. La construcción fijará el número de etapas por encima y por debajo del punto de alimentación (dos variables). Se controlará caudal de alimentación, la presión de la columna, y los servicios en el condensador y la caldera (agua de refrigeración y caudales de corrientes) (cuatro variables). Por lo tanto, existen seis variables en total.

Para diseñar la columna se debe especificar este número de variables, pero no se necesita seleccionar justamente estas mismas variables. Típicamente, en una situación de diseño el caudal del alimento se fijará por el diseñador. La presión de la columna también generalmente se fijará al principio del diseño. Generalmente los procesos de destilación trabajan a presiones bajas, donde la volatilidad relativa es elevada, pero por lo general la presión está limitada a ser lo suficientemente elevada para que el condensador trabaja usando agua de refrigeración en lugar de refrigerantes. Si se especifican el caudal del alimento y la presión entonces quedan cuatro grados de libertad.

Si se especifican dos parámetros independientes adicionales, entonces el problema es completamente definido y tiene una única solución. Por ejemplo, si el diseñador especifica una razón de reflujo y una razón de ebullición o una razón de reflujo y un caudal de destilado, entonces existirá una única solución para las composiciones de destilado y del fondo para una composición de alimentación dada. Si el diseñador elige especificar las composiciones de dos compuestos clave o bien en el destilado o bien en el residuo entonces existirá un caudal de reflujo, un caudal de ebullición, un caudal de destilación, etc que proporcione las composiciones de los compuestos claves especificados. De forma similar, especificando la pureza y la recuperación de un solo componente en uno de los productos, el problema quedará totalmente especificado.

Cuando se reemplazan variables identificadas por la aplicación de la norma de descripción es importante asegurarse que las variables seleccionadas son realmente independientes, y que los

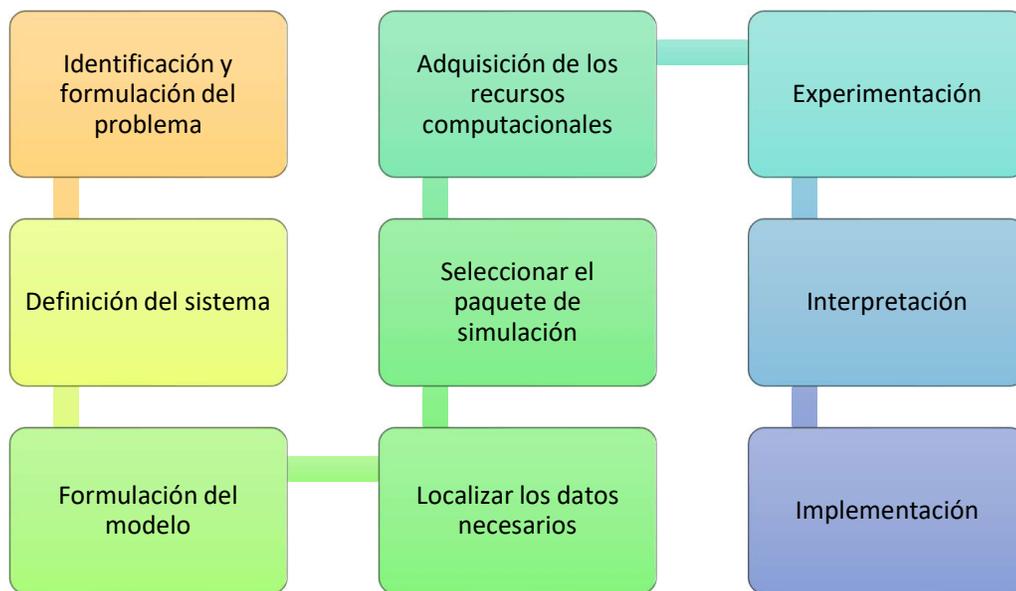
valores asignados a ellos se encuentran dentro del rango de valores posibles y prácticos. Esto es particularmente importante cuando se usan especificaciones de pureza o composición en la destilación multicomponente. Es claro que no sería posible obtener un 99% de pureza del componente clave ligero en el destilado si la alimentación contiene un 2% de compuestos que hierven a temperaturas más bajas que el componente clave ligero. (Sinnott & Towler, 1967).

### 2.2.13 *Simulador de procesos*

La simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permiten tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso. (Siqueira et al., 2019). La ingeniería de procesos ofrece una amplia variedad de métodos termodinámicos y propiedades físicas, datos que son aplicables a prácticamente todas las industrias(Aveva Group, 2019).

#### 2.2.13.1 *Etapas para el desarrollo de la simulación*

En la preparación de la simulación de un proceso existen ciertos pasos a seguir en pequeña o gran esca la. Los cuales podemos se puede apreciar a continuación.



**Figura 16-2:** Etapas para el desarrollo de simulación  
Fuente: (Rodgers, 2019)

**Identificación y formulación del problema:** en este paso debe quedar perfectamente establecido el objeto de la simulación. Implicando la recopilación de datos que describen las diferentes variables de entrada e identificación de sus límites. Habrá entonces que escoger algo que hará la diferencia en términos de ganar nuevas percepciones o de ofrecer mejoras importantes a los problemas que serán sometidos a simulación.

**Definición del sistema:** el sistema en el cual se va a realizar la simulación debe estar perfectamente definido, identificando dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el exterior que serán consideradas.

**Formulación del modelo:** comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real, en los que éstos dependen de la formulación del problema.

**Localizar los datos necesarios:** el diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticos y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos. La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades, el uso de un modelo inadecuado puede cambiar los resultados de la simulación y perder validez. Los errores en la simulación por una mala selección del modelo de propiedades físicas no se pueden detectar o prevenir fácilmente, los resultados parecen correctos, pero son erróneos. Se encontrará que los resultados de la simulación serán más sensitivos para ciertas variables que otras. Habrá de intentar ajustar algunos de los parámetros desconocidos y considerar la importancia.

**Seleccionar el paquete de simulación:** la simulación es implementada utilizando algún lenguaje de computación. Existen lenguajes específicos de simulación que facilitan esta tarea; también, existen programas que ya cuentan con modelos implementados para casos especiales. Los simuladores de procesos en estado estacionario pueden ser fácilmente incorporados en los procesos que se desarrollan a nivel de las operaciones unitarias, así como también en cálculos diversos en reactores químicos.

Además, contienen paquetes termodinámicos capaces de representar el comportamiento de sistemas en equilibrio termodinámico, así como de diferentes equipos utilizados. Las opciones para uso de simuladores de procesos dinámicos son limitados, debido a las siguientes razones:

- Incorporación de técnicas de simulación robustas para calcular la respuesta de los procesos en función del tiempo tienden a ser complejos.
- Es difícil diseñar e implementar simuladores dinámicos para uso general debido a variables específicas para cada equipo.
- Existe una carencia de apreciación del valor de la simulación dinámica (Sistema que permite conocer los cambios o alteraciones de variables en el tiempo).

**Adquisición de los recursos computacionales:** el paquete de simulación seleccionado en la etapa anterior determinará los recursos computacionales, o en ciertos casos requerimientos de sistema en relación a software y hardware seleccionados. Algunos paquetes requerirán una amplia gama de recursos, tales como estaciones de trabajo complejas, mientras que otros tan solo requerimientos generales de una computadora personal.

**Experimentación:** en esta etapa se realizan las simulaciones de acuerdo al diseño previo. Los resultados obtenidos son debidamente recolectados y procesados.

**Interpretación:** se analiza la sensibilidad que tiene el modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de los mismos las respuestas varían notablemente. Si es así, se deberán recolectar datos adicionales para refinar la estimación de parámetros críticos.

**Implementación:** el manejo de los simuladores desarrollados debe ser amigable, de tal forma que permita una fácil implementación y un uso adecuado, así como el aprendizaje y reconocimiento de las señales de error cuando las cosas no andan bien, ya que se corre el peligro debido al desconocimiento de las limitaciones y alcances del simulador utilizado, evitando sobrepasar los límites para los cuales ha sido diseñado.

Para los programas de computación (simulación) comerciales el entrenamiento para la implementación de softwares de simulación es impartido mediante un curso desarrollado por la compañía que lo ha vendido, acompañado por un manual de usuario, tutoriales, soporte técnico y actualizaciones de algunas aplicaciones.

#### 2.2.14 Modelos termodinámicos

La elección del método termodinámico es clave para la correcta simulación del proceso de conversión termoquímica estudiado. Dicha elección depende de los compuestos presentes y de las condiciones de operación (temperatura, presión)(Campanario, 2016).

Estos modelos utilizan herramientas como:

- Ecuación de estado ( Peng and Robinson)
- Correlaciones empíricas y semiempíricas (Braun/Grayson)
- La ley de estado correspondiente (Lee and Kesler)

“ Las desviaciones documentadas entre dos modelos extremos aumentan un 5% en la cantidad de vapor generado en la zona flash o en la carga térmica del condensador al tope. Puede existir también desviaciones de 3°C A 5°C en las temperaturas de salida y se ha visto una variación del 20%en la zona overflash” (Ptak, 2000).

##### 2.2.14.1 Ecuaciones de Estado

A continuación, se provee información adicional sobre ecuaciones de estado que podrían ser útiles para simulación de sistemas que utilicen crudo de petróleo, si bien es cierto hay variedad de ecuaciones, sólo se mencionarán las que, por los heurísticos y experiencias consultadas, son aptas para este tipo de escenarios.

- **Peng Robinson y variantes.**- fijaron varios objetivos para la derivación de la Ecuación de Estado que recibió su nombre en 1976. En principio decidieron desarrollar una ecuación de estado de dos parámetros y de tercer grado respecto al volumen que cumpliera lo siguiente):
  - Los parámetros deberían ser expresados como funciones de  $P_c$  (presión crítica),  $T_c$  (temperatura crítica) y el factor acéntrico  $\omega$  de Pitzer.
  - Debería obtenerse una mejor aproximación de las propiedades en las proximidades del punto crítico, especialmente en la determinación de  $Z_c$  y la densidad de la fase líquida.
  - Las reglas de mezcla no deberían utilizar más de un parámetro de interacción binaria, el cual debería ser independiente de la temperatura, presión y composición.

- Debería poder aplicarse a todos los cálculos de las propiedades termodinámicas de fluidos en procesamiento de gas natural.

Este modelo es ideal para cálculos ELV así como la densidad de líquidos para los sistemas de hidrocarburos. Proporciona una precisión razonable cerca del punto crítico, sobre todo para los cálculos del factor de compresibilidad y la densidad del líquido, pero cumple con extender su rango de aplicabilidad en presión y temperatura. Sin embargo, para algunas situaciones de alta no idealidad se recomienda el uso de modelos de actividad.

- **Sour PR.**- La ecuación Sour PR combina la ecuación Peng-Robinson y el método APISour de Wilson para manejar sistemas ácidos acuosos. Para el cálculo de las fugacidades y entalpías de las fases líquido y vapor en hidrocarburos usa la ecuación de Peng-Robinson. Los valores de las constantes de equilibrio para la fase acuosa se calculan con el método APISour de Wilson. Este modelo puede usarse en columnas que tratan crudo o cualquier proceso donde se encuentren hidrocarburos, gases ácidos y agua (Hechavarría, Rodney; López, 2018).

- **Soave-Redlich-Kwong (SRK).**- La termodinámica de soluciones ideales se aplica con gran frecuencia a mezclas de componentes no polares, especialmente hidrocarburos tales como parafinas y olefinas. Para la presión de convergencia los valores de  $K_i$  para todas las especies de la mezcla se hacen iguales a la unidad, resultando imposible la separación mediante operaciones basadas en el equilibrio líquido-vapor. La ecuación SRK permite el cálculo no solo de equilibrio de fases sino de todas las propiedades ( $\rho$ ,  $h$ ,  $S$ ,  $C_p$ , etc.) de un sistema, lo cual resulta conveniente ya que llevar a cabo dicho cálculo mediante el mismo modelo proporciona conjuntos de propiedades consistentes (Soave & Coto García, 2007).

- **Chao Seader y Grayson Streed.**- En la industria petrolera las ecuaciones de estado (EOS) han desempeñado un papel central en el modelado termodinámico del equilibrio líquido-vapor (ELV) de hidrocarburos, sin embargo, proporcionan resultados inexactos bajo ciertas condiciones. “Las principales dificultades desde el punto de vista termodinámico que se presentan dentro de procesos de separación en la industria de refinación, y en particular, las etapas de separación del proceso que involucran gases livianos, son las siguientes: presencia de hidrógeno, presencia de sulfuro de hidrógeno y mezclas complejas de hidrocarburos, compuestos sulfurados y nitrogenados sometidas a altas presiones y temperaturas.” (Lopez & Pernalet, 2010) Para estos casos pueden emplearse modelos termodinámicos especiales tales como Chao-Seader o Grayson-Streed.

Estos métodos utilizan un conjunto de ecuaciones para la fase de vapor y otro para la fase líquida, de manera similar. Para la fase de vapor se emplea la ecuación de estado de Redlich- Kwong; muy conveniente dada su simplicidad y por el hecho de que sólo los valores de las propiedades críticas de los compuestos y pseudocompuestos en la mezcla son requeridos. Para la fase líquida, ambos métodos usan la teoría de soluciones regulares de Scatchard- Hildebrand para el cálculo del coeficiente de actividad, además una relación empírica para el cálculo del coeficiente de fugacidad del compuesto puro (Hechavarría, Rodney; López, 2018).

### **2.2.15 Simulador DWSIM**

Los grandes simuladores de procesos comerciales, como el Aspen-HYSYS, si bien son muy potentes, tienen un precio que queda fuera del presupuesto de pequeñas empresas, universidades, tecnológicos y de los estudiantes. DWSIM es un simulador de procesos, de código abierto y descarga libre. Se dice que es de código abierto, porque cualquier persona interesada puede acceder al código fuente de la aplicación, adaptarlo a sus necesidades o corregir errores. Y como muchas aplicaciones de código abierto su descarga es totalmente gratuita.

DWSIM fue desarrollado originalmente por Daniel Medeiros, un ingeniero de procesos brasileño, en 2006, al que luego se le sumó Gregor Reichert. DWSIM tiene una interfaz gráfica intuitiva y fácil de usar, con muchas de las funciones que encuentras en simuladores comerciales. Permite usar una lista completa de operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas reactivos y herramientas de caracterización de crudos (Martínez Sifuentes, Alonso Dávila, López Toledo, Salado Carbajal, & Rocha Uribe, 2000).

## CAPÍTULO III

### 3. METODOLOGÍA

#### 3.1 Introducción

El diseño de la torre de fraccionamiento busca definir y ejecutar la metodología óptima que permita cumplir los objetivos planteados, una guía de esto lo provee el análisis del estado del arte que provisiona una primera aproximación a la solución. En resumen, la metodología consta de etapas básicas como; recopilación de datos, el estudio y ejecución de la literatura y la simulación de resultados; cada etapa tendrá sub-etapas que permitirán el diseño global de la torre de fraccionamiento.

#### 3.2 Hipótesis e Identificación de variables

##### 3.2.1 Hipótesis

###### 3.2.1.1 Hipótesis general

Los precursores químicos serán identificados a partir de los resultados del diseño y simulación de una torre de fraccionamiento, empleando como alimentación los residuos líquidos de la pirólisis de polipropileno.

###### 3.2.1.2 Hipótesis específicas

Con las unidades de transferencia se identifican los precursores químicos en la simulación.

Los resultados de la cromatografía de la fracción líquida por pirólisis catalítica, permiten obtener las curvas de equilibrio.

Mediante publicaciones relacionadas a la fracción molar de diversos componentes; se validarán con este precedente los subproductos obtenidos por medio de simulación, así como analizar el error relativo obtenido.

### 3.2.2 Identificación de las variables

Para la ejecución del presente trabajo de titulación, desde la fase inicial se tomaron en cuenta varios aspectos que definieron la hoja ruta del mismo, de entre los cuales constan las variables independientes como dependientes. A continuación, se enlistan de acuerdo a su pertinencia.

#### 3.2.2.1 Variables independientes

- Temperatura de operación.
- Presión de operación.
- Composición de alimentación.
- Flujo de alimentación.

#### 3.2.2.2 Variables dependientes

- Fracción molar de acuerdo al tipo de hidrocarburos.
- Composición de los productos de destilación.

### 3.2.3 Operacionalización de variables y matriz de consistencia.

**Tabla 3-3:** Operacionalización de variables independientes

VARIABLE INDEPENDIENTE	CONCEPTUALIZACIÓN	DIMENSIONES	INDICADORES	DEFINICIÓN DE LOS INDICADORES	CRITERIO DE MEDICIÓN	TÉCNICA	INSTRUMENTO	ESCALA
Temperatura de operación	Magnitud física, que permite la separación de acuerdo al punto de ebullición.	Temperatura de tope y fondo.	Separar líquidos mayores de -7°C	Temperatura de tope y fondo.	Continua	Analítica	Simulador	[ -7 391]°C
Presión de operación	Magnitud física, en la cual afecta el grado de separación que se puede alcanzar en la torre.	Presión	Acercarse 1 atm	Presión	Continua	Analítica	Simulador	1 atm
Flujo de alimentación	Tiene una sola alimentación que aumentará el nivel de fondo de la columna, así como el contenido en ligeras partes del producto de fondo.	Flujo de alimentación	Flujo de alimentación mayor a 100 Mol/ h	Flujo de alimentación	continua	Analítica	Simulador	Flujos de caudales variables.

Composición de alimentación	La cantidad de cada componente que se encuentra en el desecho líquido por pirólisis catalítica.	Composición de alimentación	Fración molar $< 1$	Composición de alimentación	continua	Analítica	Cromatografía de gases.	$0 \leq z_i \leq 1$
-----------------------------	---	-----------------------------	---------------------	-----------------------------	----------	-----------	-------------------------	---------------------

Fuente: Orma, Johana. 2021

Elaborador por: Orma, Johana. 2021

**Tabla 4-3:** Operacionalización de variables dependientes

VARIABLE DEPENDIENTE	CONCEPTUALIZACIÓN	DIMENSIONES	INDICADORES	DEFINICIÓN DE LOS INDICADORES	CRITERIO DE MEDICIÓN	TÉCNICA	INSTRUMENTO	ESCALA
Fración molar(xi) de acuerdo al tipo de hidrocarburos.	Es la cantidad de moles de cada componente que se destila del residuo líquido por pirólisis catalítica.	Fración molar en cabeza y fondo.	Fración molar $< 1$	Fración molar en cabeza y en fondo.	Continua	Analítica	Simulador	$0 \leq x_i \leq 1$
Composición de los productos de destilación.	Es el componente de la destilación que se va obtener mediante la simulación.	Composición	Estructura química del compuesto.	Composición	Continua	Analítica	Simulador	C4-C19

Fuente: Orma, Johana. 2021

Elaborador por: Orma, Johana. 2021

**Tabla 5-3:** Matriz de consistencia

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	OBJETIVO GENERAL	HIPÓTESIS	VARIABLES	INDICADORES	TÉCNICAS	INSTRUMENTOS
¿Qué precursores químicos serán identificados, mediante el diseño y simulación de la torre de fraccionamiento?	Diseñar y simular una torre de fraccionamiento del producto líquido de pirólisis del polipropileno, para identificar los precursores químicos.	Los precursores químicos serán identificados a partir de los resultados del diseño y simulación de una torre de fraccionamiento, empleando como alimentación los residuos líquidos de la pirólisis de polipropileno.	<b>Independiente.</b> -Composición de alimentación	$0 \leq z_i \leq 1$	Analítica	Simulador
			-Temperatura de operación	Separar líquidos a mayor de $-7^{\circ}\text{C}$	Analítica	Simulador
<b>FORMULACIÓN DEL PROBLEMA</b>	<b>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</b>	<b>HIPÓTEIS</b>				
¿Cuál es el número de unidades de transferencia de la torre de fraccionamiento?	Analizar los criterios que conllevan la identificación de precursores químicos, en el contexto de la determinación del número de unidades de transferencia de la columna de fraccionamiento.	Con las unidades de transferencia se identifican los precursores químicos en la simulación.	Presión de operación	Acercarse 1 atm	Analítica	Simulador

¿Cuál sería la curva de equilibrio según los resultados de cromatografía de la fracción líquida de la pirólisis de polipropileno?	Sintetizar el estado del arte con relación a la identificación de precursores químicos que conllevan la determinación de la curva de equilibrio; según los resultados de cromatografía de la fracción líquida de la pirólisis catalítica del polipropileno.	Los resultados de la cromatografía de la fracción líquida por pirólisis catalítica, permiten obtener las curvas de equilibrio.				
¿Cuáles son las condiciones óptimas del fraccionamiento de la alimentación para emplear el software DWSIM, como herramienta de simulación?	Determinar las condiciones óptimas de fraccionamiento de la alimentación empleando el software DWSIM, como herramienta de simulación en la identificación de precursores químicos.	Al determinar las condiciones óptimas para el fraccionamiento de la alimentación en el simulador DWSIM, se identifican los factores que afectan al producto final.	Flujo de alimentación	Mol/h	Analítica	Simulador
¿De qué forma se podrían validar los resultados de la simulación?	Validar el diseño propuesto comparando teóricamente la fracción molar por componente con resultados de investigaciones análogas, así como el error relativo obtenido a partir de la simulación de la torre de fraccionamiento con el software DWSIM.	Mediante publicaciones relacionadas a la fracción molar de diversos componentes; se validarán con este precedente los subproductos obtenidos por medio de simulación, así como analizar el error relativo obtenido.	Dependiente Fracción molar(xi) de acuerdo al tipo de hidrocarburos	Fracción molar < 1	Analítica	Simulador
			Composición de los productos de destilación.	Estructura química del compuesto.	Analítica	Simulador

Fuente: Orna, Johana. 2021

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

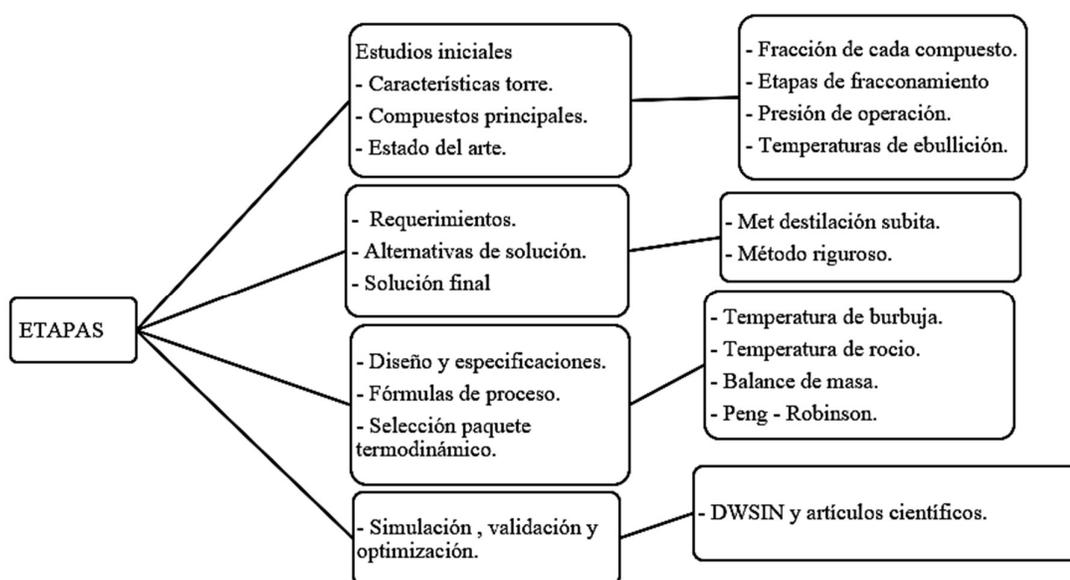
### 3.3 Tipo y diseño de investigación

El tipo de investigación para el presente proyecto es no experimental y de tipo exploratorio-diagnóstico, dado que, si bien hay investigaciones previas al respecto; no es un tema ampliamente investigado. Así también, la investigación descriptiva se acopla en gran medida al proyecto, debido a que al diseñar la torre de fraccionamiento se van a obtener las variables del proceso que son necesarias para la simulación, y así obtener como resultado los precursores químicos de manera cualitativa y su fracción de forma cuantitativa.

### 3.4 Métodos de investigación

El presente estudio propone el método analítico, ya que a partir del desecho líquido de la pirólisis de polipropileno, se van a analizar y obtener cuáles son los componentes que se encuentran inmerso para realizar los cálculos correspondientes al diseño y simulación; con el fin de conocer los precursores químicos que se podrán obtener.

También se ajusta al método de modelación, debido a que se tendrán que manipular algunos parámetros, para obtener mejores resultados e identificar el modelo termodinámico correcto y alcanzar así, los datos más reales posibles.



**Figura 17-3:** Metodología propuesta – torre de fraccionamiento.

Fuente: Orna, Johana. 2021

### 3.5 Enfoque y alcance de la investigación

El enfoque para el siguiente proyecto de titulación es de carácter cuantitativo, porque permitirá examinar de manera numérica la fracción molar de los precursores químicos; y además cualitativo ya que identificará a éstos al ser obtenidos en la simulación de la destilación fraccionaria. Así también el alcance es de tipo exploratorio, debido a que se necesitan identificar los componentes químicos de la fase líquida de los desechos de la pirólisis del polipropileno; para posteriormente generar el diseño de la torre de fraccionamiento, con el fin de reconocer cuáles son los precursores químicos que se van a obtener en la simulación; y finalmente descriptiva porque se van a identificar cuáles son las condiciones óptimas en la simulación para obtener los precursores químicos antes mencionados.

### **3.6 Unidad de análisis y muestra**

La unidad de análisis en esta investigación se centró en conocer cuáles son los precursores químicos que se encuentran inmersos en el desecho líquido de la pirolisis de polipropileno, para ello se analizará este líquido en el Cromatógrafo Gc- Ms, con el fin de conocer los compuestos con los que se va a trabajar en el diseño y simulación. Para la selección de la muestra se analiza una sola del desecho líquido de la pirolisis de polipropileno, dependiendo del resultado de la cromatografía; se realizarán los cálculos con los compuestos que tengan mayor presencia en porcentaje, además, se excluirán aquellos compuestos que tengan átomos de oxígeno; debido que el proceso de pirolisis es en ausencia de mismo. Finalmente se aplicará el 100% de la población, debido a que la misma no es representativa.

### **3.7 Técnicas de recolección de datos**

Para obtener información fiable y lograr los objetivos esperados; es necesario emplear técnicas de recolección de datos eficientes. En este sentido se va diseñar la torre de fraccionamiento en función de los componentes que se encuentran inmersos en los desechos líquidos de la pirolisis. Estos componentes al ser simulados en la torre de fraccionamiento; arrojarán datos cercanos a los reales de proceso, para de esta forma conocer cuáles son los precursores químicos presentes. A continuación, se presenta la metodología a seguir en lo relacionado al diseño y simulación de la torre de fraccionamiento:

### **3.8 Diseño de la torre de fraccionamiento**

Después de haber analizado el estado del arte para el diseño de la torre de fraccionamiento, en este punto se presentan las etapas de cálculo que permitieron conseguir los objetivos planteados en el presente proyecto. En una primera instancia se obtuvieron los compuestos principales con los que se va a trabajar, mismos que conforman el 70% del líquido pirolítico de polipropileno, siendo los 6 seleccionados Naftas y Parafinas. Luego de esto el proyecto se ejecutó en tres etapas fundamentales: la primera se relaciona con la obtención de una base de cálculo fruto de la selección de parámetros acordes a las condiciones de funcionamiento de la torre, con estos datos se procede al cálculo manual de los aspectos que conllevan la destilación súbita de una mezcla multicomponente, finalmente, con los resultados obtenidos se realiza una optimización en función de la variación de parámetros, para de esta forma con los parámetros a la condición más óptima; ejecutar el método riguroso para alcanzar el mayor porcentaje del componente clave ligero en el

destilado, y el clave pesado en el fondo. Cabe mencionar que la tercera etapa mencionada corresponde a la simulación en el software DWSIM.

### 3.9 Procedimiento de cálculo

#### 3.9.1 Compuestos inmersos en la Pirolisis de polipropileno.

Mediante las pruebas de pirolisis catalítica se llegó al siguiente análisis, tomando un total del 70% de la muestra y una base de cálculo de 100kg/h para la alimentación. Se puede observar en la tabla, los compuestos que se encuentran inmersos en el líquido de la pirolisis de polipropileno que se analizaron mediante el Cromatógrafo Gc- Ms, con los cuales se realiza los cálculos previos para la simulación.

**Tabla 6-3:** Compuestos inmersos en la Pirolisis de polipropileno.

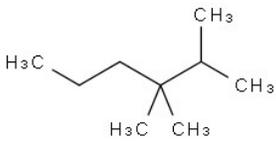
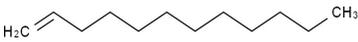
Compuesto	Área	Fracción	Flujo masico (kg/h)
2,3,3 trimethyl hexane	21,93	0,39	38,52
1-dodecene	14,56	0,26	25,58
4-Methylpent-1-ene	9,22	0,16	16,20
Tridec-1-ene	4,69	0,08	8,25
2,3,3,5 Tetramethyl hexane	4,25	0,07	7,47
4-methylheptane	2,26	0,04	3,98
<b>Suma</b>	56,91		
<b>Base de cálculo kg/h</b>	100		
<b>Área total calculado %</b>	70,00		

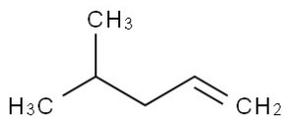
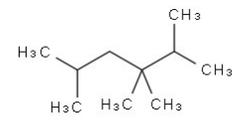
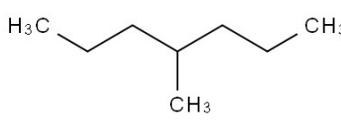
Fuente: Orna, Johana. 2021

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

En la siguiente tabla se muestra la información como fórmula, compuesto, estructura molecular, peso molecular, y temperatura de ebullición; de varios compuestos a analizar, todos sacados de la librería del software DWSIM. Los datos mencionados son de vital importancia para el cálculo de los parámetros previos a la simulación.

**Tabla 7-3:** Información de las propiedades químicas de los compuestos.

Compuesto	Formula	PM kg/kmol	T ebullición °C
2,3,3-Trimethylhexane 	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>	128.3	128,3
1-dodecene 	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub>	168.3	168.3

<p>4-Methylpent-1-ene</p> 	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	84.16	84.16
<p>Tridec-1-ene</p> 	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub>	182.4	182.4
<p>2,3,3,5 Tetra-methyl hexane</p> 	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	142.3	142.3
<p>4-methylheptane</p> 	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	114.2	114.2

Fuente: Orna, Johana. 2021

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

### 3.9.2 Cálculos de la temperatura de burbuja

Se aplicará el cálculo de la destilación súbita (flash), para encontrar las temperaturas de burbuja (punto de burbuja) utilizando las constantes de Antoine con su ecuación para calcular las presiones parciales y las volatilidades relativas a una temperatura supuesta, los cálculos serán satisfactorios cuando la temperatura supuesta sea igual a la calculada, estos cálculos son a prueba y error.

#### 3.9.2.1 Cálculo presión de vapor

Temperatura inicial supuesta para los cálculos 112.62°C, con esta temperatura se calcularon las presiones de vapor para cada compuesto.

- **C<sub>9</sub>H<sub>18</sub>**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6.85417 - \frac{1389.79}{111.62 + 273.15}}$$

$$P' = 363.902 \text{ mmHg} = 0.48 \text{ atm}$$

- **C<sub>12</sub>H<sub>24</sub>**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6,97522 - \frac{1619,862}{111,62+182,271}}$$

$$P' = 29.069 \text{ mmHg} = 0.04 \text{ atm}$$

**- C6H12**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6,8352 - \frac{1121,302}{111,62+22,687}}$$

$$P' = 3547.91 \text{ mmHg} = 4.67 \text{ atm}$$

**- C13H24**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6,98563 - \frac{1674,741}{111,62+1,214}}$$

$$P' = 14.03 \text{ mmHg} = 0.02 \text{ atm}$$

**- C10H22**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6,85043 - \frac{1429,2}{111,62+20,9}}$$

$$P' = 230.90 \text{ mmHg} = 0.30 \text{ atm}$$

**- C8H18**

$$P' = 10^{A - \frac{B}{T+C}}$$

$$P' = 10^{6,900 - \frac{1327,661}{111,62+212,568}}$$

$$P' = 638.72 \text{ mmHg} = 0.84 \text{ atm}$$

**Tabla 8-3:** Resultados de las presiones parciales.

Compuestos	A	B	C	Pi'(atm)
<b>C9H18</b>	6,85417	1389,79	212,1	0,48
<b>C12H24</b>	6,97522	1619,862	182,271	0,04
<b>C6H12</b>	6,83529	1121,302	229,687	4,67
<b>C13H24</b>	6,98563	1674,741	175,214	0,02
<b>C10H22</b>	6,85043	1429,2	206,9	0,30
<b>C8H18</b>	6,90065	1327,661	212,568	0,84

Fuente: (Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot, 2013)

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

### 3.9.2.2 Volatilidad relativa

#### - C9H18

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{0.48}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 1$$

#### - C12H24

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{0.04}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 0.08$$

#### - C6H12

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{4,67}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 9,75$$

#### - C13H24

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{0,02}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 0.04$$

**- C10H22**

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{0,30}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 0.63$$

**- C8H18**

$$\alpha_{ij} = \frac{P_i'}{P_j'}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{0,84}{0.48}$$

$$\alpha_{ij} = 1.76$$

3.9.2.3 *Volatilidad relativa con respecto a la fracción de alimentación.*

**- C9H18**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$1 * 0.39 = 0.39$$

**- C12H24**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$0.08 * 0.26 = 0.020$$

**- C6H12**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$9.75 * 0.16 = 1.56$$

**- C13H24**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$0.04 * 0.08 = 0.003$$

- **C10H22**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$0.63 * 0.07 = 0.04$$

- **C8H18**

$$\alpha_{ij} * z_i$$

$$1.76 * 0.04 = 0.07$$

$$\sum \alpha_i * z_i = 0.39 + 0.021 + 1.56 + 0.003 + 0.04 + 0.07 = 2.088$$

3.9.2.4 *Obtención de la fracción del destilado.*

- **C9H18**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{0.39}{2.088}$$

$$y_i = 0.187$$

- **C12H24**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{0.02}{2.088}$$

$$y_i = 0.010$$

- **C6H12**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{1.56}{2.088}$$

$$y_i = 0.747$$

**- C13H24**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{0.003}{2.088}$$

$$y_i = 0.001$$

**- C10H22**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{0.04}{2.088}$$

$$y_i = 0.021$$

**- C8H18**

$$y_i = \frac{\alpha_{ij} * z_i}{\sum x_i \alpha_{ij}}$$

$$y_i = \frac{0.07}{2.088}$$

$$y_i = 0.031$$

3.9.2.5 *Obtención de la presión en función de la fracción del destilado y presión de operación.*

**- C9H18**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.187 * 1 = 0.187 \text{ atm}$$

**- C12H24**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.010 * 1 = 0.010 \text{ atm}$$

- **C6H12**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.747 * 1 = 0.747 \text{ atm}$$

- **C13H24**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.001 * 1 = 0.001 \text{ atm}$$

- **C10H22**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.021 * 1 = 0.021 \text{ atm}$$

- **C8H18**

$$P_i = y_i * P$$

$$0.031 * 1 = 0.031 \text{ atm}$$

3.9.2.6 *Obtención de la presión de vapor en función de la fracción de alimentación*

- **C9H18**

$$P_i' = \frac{P_i}{z_i}$$

$$P_i' = \frac{0.187}{0.39}$$

$$P_i' = 0.479 \text{ atm}$$

- **C12H24**

$$P_i' = \frac{0.01}{z_i}$$

$$P_i' = \frac{0.48}{0.02}$$

$$P_i' = 0.038 \text{ atm}$$

- **C6H12**

$$P_i' = \frac{P_i}{z_i}$$
$$P_i' = \frac{0.747}{1.56}$$
$$P_i' = 4.668 \text{ atm}$$

- **C13H24**

$$P_i' = \frac{P_i}{z_i}$$
$$P_i' = \frac{0.001}{0.003}$$
$$P_i' = 0.018 \text{ atm}$$

- **C10H22**

$$P_i' = \frac{P_i}{z_i}$$
$$P_i' = \frac{0.021}{0.07}$$
$$P_i' = 0.304 \text{ atm}$$

- **C8H18**

$$P_i' = \frac{P_i}{z_i}$$
$$P_i' = \frac{0.031}{0.04}$$
$$P_i' = 0.840 \text{ atm}$$

3.9.2.7 *Obtención de la temperatura de ebullición en función de los cálculos de las volatilidades*

$$T_{eb} = \frac{B}{A - \log_{10}(P_i' * 760)} - C$$
$$T_{eb} = \frac{1389.79}{6.85417 - \log_{10}(0.479 * 760)} - 212.1$$
$$\mathbf{T_{eb} = 111.62^\circ\text{C}}$$

La temperatura de ebullición calculada es igual a la estimada sin necesidad de volver a hacer más cálculos.

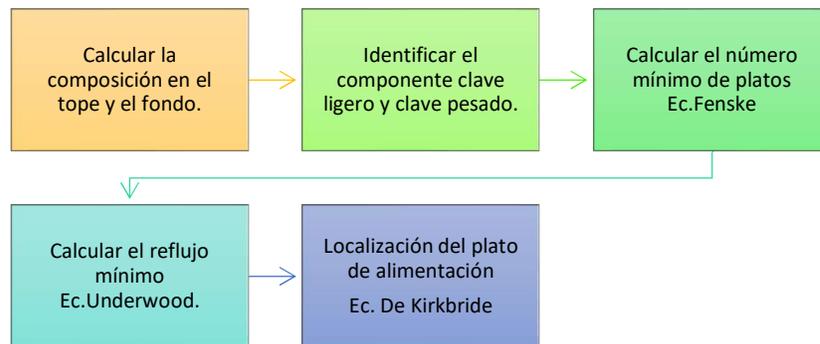
### 3.9.2.8 Cálculos de la temperatura de Roció

Para encontrar la temperatura de roció se realiza el mismo procedimiento que la temperatura de burbuja, en este caso la temperatura supuesta es de 185.014°C. Una vez obtenida la temperatura de burbuja donde, se forma la primera burbuja de vapor al momento que se calienta el líquido, además, la temperatura de roció se encuentra en el fondo misma que propicia la formación de líquido; es mayor a la temperatura de burbuja. Para obtener la temperatura de alimentación se calcula el promedio entre estas dos temperaturas.

$$T \text{ de alimentacion} = \frac{114.62 + 185.014}{2}$$
$$T \text{ de alimentacion} = 148.32 \text{ } ^\circ\text{C}$$

### 3.9.3 Cálculos del método corto (Parámetros necesarios para la simulación)

Es un método que proporciona parámetros de diseño óptimos para columnas de destilación con configuraciones simples, para su aplicación se asumen volatilidades relativas constantes y caudales molares también constantes, dentro de cada sección de destilación.



**Figura 18-3:** Flujograma determinación variables de entrada simulación.  
Fuente: Orna, Johana. 2021

#### 3.9.3.1 Composición en el tope y el fondo.

Las concentraciones tanto en el tope como el fondo se obtuvieron mediante el cálculo de la temperatura de burbuja y roció en la tabla 4-5 de resultados.

**Tabla 9-3:** Datos de las concentraciones mediante el método corto.

	Compuestos	Alimentación	Destilado	Fondo
	Tridec-1-ene	0,08	0.00	0.28
HK	1-dodecene	0,26	0.01	0.54
	2,3,3,5 Tetramethyl hexane	0,07	0.02	0.03
	2,3,3-Trimethylhexane	0,39	0.19	0.13
LK	4-methylheptane	0,04	0.03	0.01
	4-Methylpent-1-ene	0,16	0.75	0.01

Fuente: Orna, Johana. 2021  
 Elaborador por: Orna, Johana. 2021

Para la identificación del compuesto clave ligero (LK) más volátil y clave pesado (HK) menos volátil, se basó en la volatilidad relativa que se especifica en el destilado, una vez obtenidos estos resultados se realizó un balance masa, el caudal de destilado obtenido es de 39.65 Kg/h en el destilado y 60.35 Kg/h en el fondo.

### 3.9.3.2 Cálculo del número mínimo de platos. (Fenske)

$$N_m = \frac{\ln \left( \frac{X_{LD}D}{X_{HD}D} \right) \left( \frac{X_{HW}W}{X_{LW}W} \right)}{\ln(\alpha L_{prom})}$$

$$N_m = \frac{\ln \left( \frac{0.03}{0.01} \right) \left( \frac{0.54}{0.01} \right)}{\ln \sqrt{(21.97)(9.92)}}$$

$$N_m = 2$$

$$N = (2)(2) = 4$$

### 3.9.3.3 Cálculo para encontrar como ingresa la alimentación en la torre

$$q = \frac{(HV - HF)}{(HV - HL)}$$

$$q = \frac{(-2084.365) - (-8533.299)}{(-2084.365) - (-28580.02)}$$

$$q = 0.24$$

Para encontrar el valor de  $q$ , se utilizó la entalpía de alimentación del punto de rocío (HV), entalpía del punto de burbuja (HL) y la entalpía de la temperatura de alimentación (HF), dando un valor de 0.24, mismo que indica que la alimentación ingresa en forma de vapor.

#### 3.9.3.4 Cálculo para encontrar $\theta$

Para este cálculo se supuso que el valor de teta es 2.71, si al remplazar en la ecuación la sumatoria da un valor igual a 1, ya no se debe realizar más cálculos, caso contrario se debe seguir variando el valor de teta hasta que su valor sea igual a 1.

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_i X_{iF}}{\alpha_i - \theta}$$

$$1 = \sum \frac{\alpha_i X_{iF}}{\alpha_i - \theta} + q$$

- **C9H18**

$$\frac{8.37 * 0.39}{8.37 - 2.71} = 0.57$$

- **C12H24**

$$\frac{1 * 0.26}{1 - 2.71} = -0.15$$

- **C6H12**

$$\frac{62.16 * 0.16}{62.16 - 2.71} = 0.17$$

- **C13H24**

$$\frac{0.08 * 0.54}{0.08 - 2.71} = -0.02$$

- **C10H22**

$$\frac{5.65 * 0.07}{5.65 - 2.71} = -0.13$$

- C8H18

$$\frac{14.01 * 0.04}{14.01 - 2.71} = 0.05$$

$$\theta = 0.58 - 0.15 + 0.17 - 0.02 + 0.13 + 0.05 + 0.24$$

$$\theta = 1$$

3.9.3.5 Cálculo del reflujo mínimo. (Underwood)

$$R_m + 1 = \sum \frac{\alpha_i X_{iD}}{\alpha_i - \theta}$$

$$R_m = \frac{8.37 * 0.19}{0.37 - 2.71} + \frac{1 * 0.01}{1 - 2.71} + \frac{62.16 * 0.75}{62.16 - 2.71} + \frac{0.08 * 0.001}{0.08 - 2.71} + \frac{0.07 * 0.02}{0.07 - 2.71} + \frac{0.04 * 0.03}{0.04 - 2.71} - 1$$

$$R_m = 0.13$$

$$R = 1.5 * 0.13 = 0.20$$

3.9.3.6 Localización del plato de alimentación (Kirkbride)

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{X_{F,HK}}{X_{FLK}} \right) \left( \frac{X_{w,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \left( \frac{w}{D} \right) \right]^{0.206}$$

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{0.26}{0.04} \right) \left( \frac{0.01}{0.01} \right)^2 \left( \frac{60.39}{39.65} \right) \right]^{0.206}$$

$$\frac{N_R}{N_S} = 1.5$$

3.9.4 Cálculos del método riguroso (Simulación)

Como un análisis de contextualización de la fase de cálculos del proyecto, una vez ejecutada la parte manual de los cálculos lo que procede es la simulación de los compuestos inmersos en la pirólisis del Polipropileno.

Esto es deseable en los seis compuestos que anteriormente se escogieron para este análisis, así como datos fundamentales para el simulador, mismo que no podría realizar iteraciones de cálculo sino fuese alimentado por parámetros como: temperatura de la alimentación, temperatura de burbuja y de Rocío, así como el número de platos y la relación mínima de flujo. Sin olvidarnos del plato de alimentación. A continuación, se presentan los pasos que se tomaron para realizar la simulación en el software DWSIM.

### 3.9.4.1 Selección de los compuestos de análisis

La gran mayoría de softwares de simulación cuentan con una amplia librería de compuestos, en los cuales se describen propiedades físicas y químicas de los mismos. En el paquete informático DWSIM como se puede ver en la figura; los seis compuestos están presentes y disponibles para seleccionarlos para su posterior compilación.

Added	Name	CAS Number	Formula	Source Database	CP
<input checked="" type="checkbox"/>	Tridec-1-Ene	2437-56-1	C13H26	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	1-dodecene	112-41-4	CH3(CH2)9CH...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	2,3,3,5-Tetramethylhexane	52897-11-7	C10H22	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	2,3,3-Trimethylhexane	16747-28-7	C9H20	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	4-methylheptane	589-53-7	CH3(CH2)2CH(...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	4-Methylpent-1-Ene	691-37-2	C6H12	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Carbon tetrachloride	56-23-5	CCl4	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Air	132259-10-0	(N2)0.781 (O2)0...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Bromine	7726-95-6	BrBr	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Argon	7440-37-1	Ar	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Chlorine	7782-50-5	Cl2	ChemSep	<input type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	Hydrogen iodide	10034-85-2	HI	ChemSep	<input type="checkbox"/>

Add from Other Sources > View Selected Compound

Next > Cancel

**Figura 19-3:** Ventana de selección de compuestos DWSIM.

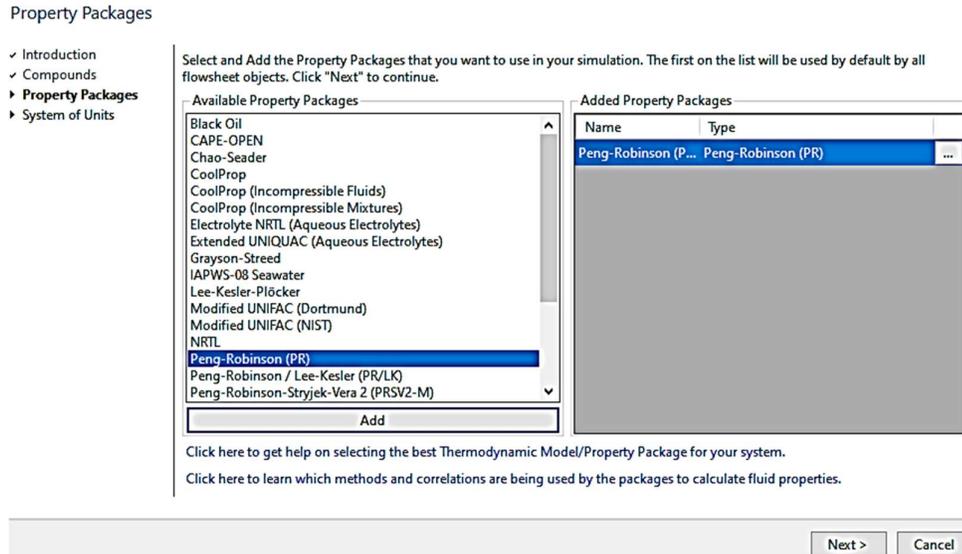
Fuente: Oma, Johana. 2021

### 3.9.4.2 Paquete termodinámico

El software DWSIM tiene varios modos de funcionamiento, uno de ellos es su muy eficiente paquete termodinámico (Peng - Robinson), que permite simular los principios termodinámicos que posibilitan obtener el comportamiento deseado durante la pirólisis catalítica. Debido a que este paquete está alineado a los compuestos seleccionados.

Adicional, cabe mencionar que el software DWSIM compila sus cálculos en función del paquete seleccionado, esto quiere decir que si de seleccionarse un paquete erróneo los resultados se verían directamente afectados. Cada paquete posee diversas ecuaciones que se ejecutan mayorando el

compuesto pertinente de entre los analizados. Esto con el fin de tener una concordancia con el valor de las variables de las constantes de equilibrio, ya que dependiendo si estas constantes guardan relación directa o indirecta con la temperatura de proceso; se tomará un rumbo del cálculo óptimo.



**Figura 20-3:** Selección del paquete termodinámico.

Fuente: Oma, Johana. 2021

### 3.9.4.3 Ingreso de parámetros de entrada DWSIM

El software DWSIM para poder compilar o correr necesita de ciertos parámetros que el operador debe ingresar, basta que uno de ellos no sea acorde a la realidad del proceso esto arrojaría una simulación no realista.

Input Data		Results	Annotations	Dynamics	Floating Tables
Stream Conditions		Compound Amounts			
Flash Spec	Temperature and Pressure (TP) ▾				
Temperature	148.32	C	▾		
Pressure	1	atm	▾		
Mass Flow	100	kg/h	▾		
Molar Flow	0.733329	kmol/h	▾		
Volumetric Flow	0.00264926	m <sup>3</sup> /s	▾		
Specific Enthalpy	-107.233	kJ/kg	▾		
Specific Entropy	-0.100853	kJ/[kg.K]	▾		
Vapor Phase Mole Fraction	0.386443				

**Figura 21-3:** Ingreso de datos de entrada.

Fuente: Oma, Johana. 2021

#### 3.9.4.4 Ingreso de fracciones pirólisis catalítica

De la misma forma que los datos de entrada y la forma de funcionamiento del simulador, las fracciones molares de cada compuesto que se analizaron en el líquido de la pirólisis, deben ser ingresadas en el software, aquí la importancia de que consten en la base de datos del programa.

MSTR-000 (Material Stream)

Information Connections

General Info

Object Alimentación

Status Info  
Press ENTER to commit changes.

Linked to

Property Package Settings

Property Package Peng-Robinson (PR) (1)

Flash Algorithm Default

Input Data Results Annotations Dynamics Floating Tables

Stream Conditions Compound Amounts

Basis Mole Fractions

Solvent

Compound	Amount	Total: 1
Tridec-1-Ene	0,08	Normalize Equalize Clear Accept Changes
1-dodecene	0,26	
2,3,3,5-Tetramethyl...	0,07	
2,3,3-Trimethylhexane	0,39	
4-methylheptane	0,04	
4-Methylpent-1-Ene	0,16	

Figura 22-3: Fracciones de compuestos en DWSIM.  
Fuente: Oma, Johana. 2021

#### 3.9.4.5 Ingreso de especificaciones requeridas para compilación

En este apartado se busca ingresar en el software los parámetros necesarios con relación al número de platos para la compilación final, para este fin se emplearon los criterios que arrojó la optimización, en el sentido de obtener mayor concentración del clave ligero en el destilado.

Specification		Configuration	Results
General Condenser Reboiler			
Absorber Operating Mode	▼		
Number of Stages	4		
Solver	Wang-Henke (Bubble Point) ▼		
Solving Scheme	Direct Rigorous ▼		
Maximum Number of Iterations	100		
Convergence Tolerance	1E-05		
Maximum Temperature Change	10		K.
Property Package	Peng-Robinson (PR) (1) ▼		⚙️
Flash Algorithm	Default ▼		⚙️

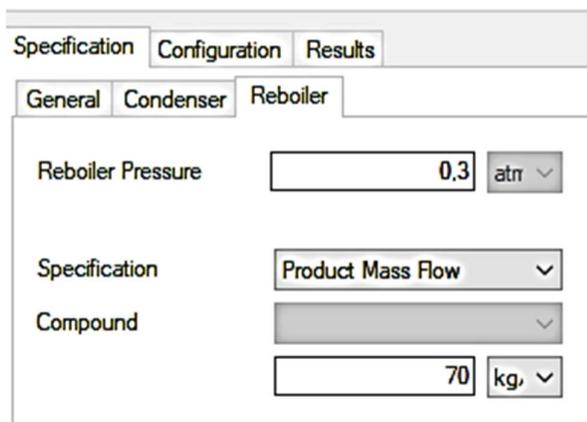
**Figura 23-3:** Especificaciones DWSIM.  
Fuente: Oma, Johana. 2021

#### 3.9.4.6 Condiciones para la simulación del condensador

Specification		Configuration	Results
General Condenser Reboiler			
Condenser Type	Total ▼		
Condenser Pressure	0.2		atm ▼
Condenser Pressure Drop	0		Pa ▼
Specification	Reflux Ratio ▼		
Compound	▼		
	5		▼
Vapor Product Flow Rate	0		mo ▼

**Figura 24-3:** Condiciones del condensador DWSIM.  
Fuente: Oma, Johana. 2021

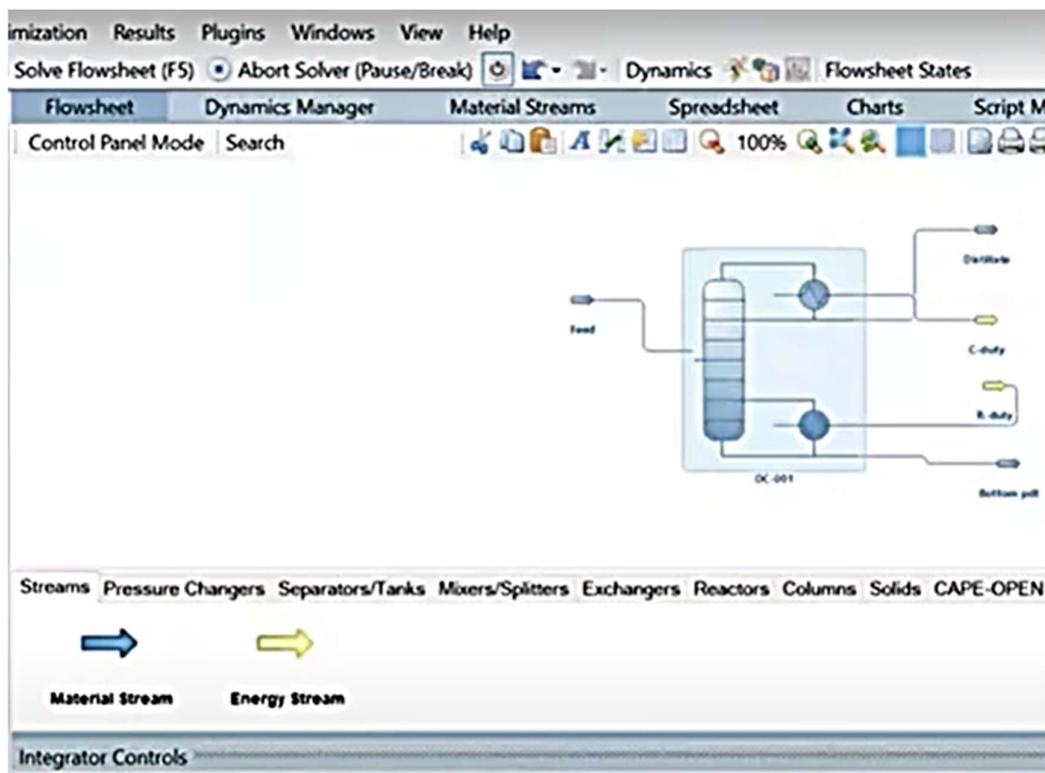
#### 3.9.4.7 Ingreso de condiciones de rehervidor (caldera)



**Figura 25-3:** Condiciones de rehervidor DWSIM.  
Fuente: Orna, Johana. 2021

#### 3.9.4.8 Compilación final de programa (Torre de fraccionamiento)

El objetivo principal del ingreso de datos anterior tiene como fin que las condiciones de compilación (corrida del programa) sean las adecuadas. Basta que un parámetro esté incorrecto para que el programa lo detecte y pinte de color rojo el esquema final. Esto es un indicativo de que es necesario corregir algún aspecto del programa. Cuando corre de forma adecuada el esquema se pinta de azul como indicador de una correcta programación, así como sus resultados.



**Figura 26-3:** Esquema final de la simulación de la torre de fraccionamiento DWSIM.  
Fuente: Orna, Johana. 2021

## CAPÍTULO IV

### 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este apartado se analizan los resultados que se han obtenido en el presente trabajo de titulación, con el fin de presentar los datos recopilados para su análisis y comprensión en el contexto de la investigación. Los resultados se dividen en 3 aspectos: en primera instancia se ejecutó la obtención de los compuestos principales con los que se trabajó, mismos que conforman el 70% del líquido pirolítico de polipropileno, siendo los 6 seleccionados de las familias de Naftas y Parafinas. El segundo aspecto se ejecutó en tres etapas fundamentales: la primera es la determinación de la base de cálculo fruto de la selección de parámetros acordes a las condiciones de funcionamiento de la torre, después se calculó de forma manual los aspectos que conllevan la destilación súbita de una mezcla multicomponente, finalmente, procede la optimización en función de la variación de parámetros, posteriormente se ejecutó el método riguroso para alcanzar el mayor porcentaje del componte clave ligero en el destilado, y el clave pesado en el fondo. Es necesario mencionar que lo que se busca es que, por medio de varias iteraciones, los resultados converjan en función de las ecuaciones utilizadas. Los resultados obtenidos se describen a continuación por medio de las tablas expuestas con datos recopilados, con estos valores se plantea la discusión para exponer las posibles variantes al proyecto que derivarían en cambios sustanciales o mejoras sujetas a investigación y desarrollo.

#### 4.1 Resultados preliminares

##### 4.1.2 Temperaturas de burbuja

En la búsqueda de la temperatura de burbuja se procedió con las ecuaciones descritas en el marco teórico, después de haber efectuado este procedimiento se presenta la tabla siguiente con relación a los datos obtenidos. Se evidencian 5 grupos de resultados en base a las volatilidades relativas, de entre los seis compuestos y sus variaciones según la optimización se encontró un valor de temperatura de ebullición de 111.62 °C.

**Tabla 10-4:** Resumen datos temperatura de burbuja.

Compuestos	$a_{ij}$	$z_i a_{ij}$	$y_i = (z_i a_{ij}) / \sum z_i a_{ij}$	$P_i = y_i \cdot P$	$P_i' = P_i / x_i$	T ebullición (°C)
<b>C9H18</b>	1,00	0,390	0,187	0,187	0,479	111,62
<b>C12H24</b>	0,08	0,021	0,010	0,010	0,038	
<b>C6H12</b>	9,75	1,560	0,747	0,747	4,668	
<b>C13H24</b>	0,04	0,003	0,001	0,001	0,018	
<b>C10H22</b>	0,63	0,044	0,021	0,021	0,304	
<b>C8H18</b>	1,76	0,070	0,034	0,034	0,840	

$\sum z_i a_{ij} =$	2,088	1	TB	111,62
---------------------	-------	---	----	--------

Fuente: Orna, Johana. 2021  
Elaborador por: Orna, Johana. 2021

#### 4.1.3 Temperatura de rocío

Al igual que en la búsqueda de la temperatura de burbuja, para la temperatura de rocío se procedió con las mismas ecuaciones, la diferencia radica en que la temperatura supuesta debe ser igual que la calculada, con este criterio y al tener ya las dos temperaturas, tanto de rocío y burbuja, con el promedio de éstas se obtiene la temperatura de alimentación, misma que es fundamental en los cálculos de la simulación. A continuación, se presenta la tabla con los resultados, en dónde la temperatura de rocío principal después de varias iteraciones resultó en 185.014 °C.

**Tabla 11-4:** Resumen datos temperatura de rocío.

Compuestos	Pi' (atm)	a <sub>ij</sub>	y <sub>i</sub> /a <sub>ij</sub>	x <sub>i</sub> =(y <sub>i</sub> /a <sub>ij</sub> ) / (∑y <sub>i</sub> /a <sub>ij</sub> )	P <sub>i</sub> =y <sub>i</sub> *P	Pi' =Pi/x <sub>i</sub> (atm)	T rocío a Pi'
C9H18	2,98	1,000	0,390	0,131	0,390	2,976	185,014
C12H24	0,48	0,162	1,602	0,538	0,260	0,483	
C6H12	17,81	5,984	0,027	0,009	0,160	17,807	
C13H24	0,29	0,096	0,834	0,280	0,080	0,286	
C10H22	2,10	0,707	0,099	0,033	0,070	2,103	
C8H18	4,79	1,610	0,025	0,008	0,040	4,792	
		$\sum y_i/a_{ij} =$	2,976	1		TR	185,014

Fuente: Orna, Johana. 2021  
Elaborador por: Orna, Johana. 2021

#### 4.1.4 Primera simulación en base al método corto

La simulación del programa según las condiciones deseadas depende de los cálculos realizados previamente, una vez teniendo a la mano los resultados, se procedió a ingresar todos los datos en las ventanas pertinentes del simulador. Después de que el mismo corriera o compilara de forma adecuada se generaron tres tablas con valores relacionados a la alimentación, destilado y la condición del fondo, fracción molar, fase líquida y vapor.

**Tabla 12-4:** Datos de entrada para la simulación.

Name	Alimentación	Destilado	Fondo
Vapour	0,38	0,00	0,00
Temperature [C]	148,32	245,10	331,97
Pressure [kPa]	101,32	1517,00	1724,00
Molar Flow [kgmole/h]	0,73	0,33	0,40
Mass Flow [kg/h]	100,00	39,66	60,34
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,13	0,05	0,08
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-181057,67	-144833,95	-119934,15
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	467,97	456,31	644,75
Heat Flow [kJ/h]	-132771,14	-47800,90	-48365,75

Fuente: Orna, Johana. 2021  
Elaborador por: Orna, Johana. 2021

En la tabla anterior se pueden observar además valores relacionados a parámetros de operación reales y deseables, como: el flujo de calor, la entalpía y entropía, flujo, presión, temperatura, fracción molar y flujo de masa.

**Tabla 13-4:** Datos simulación destilado.

Destilado	Fracción molar	Fase vapor	Fase líquida
1-Tridecene	0,448	0,319	0,448
1-Dodecene	0,102	0,027	0,102
2335-Mhexane	0,305	0,556	0,305
233-Mhexane	0,021	0,004	0,021
4-Mheptane	0,067	0,039	0,067
4M-1-pentene	0,058	0,054	0,058

Fuente: Orna, Johana. 2021

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

En las tablas 12-4 y 13-4 se presentan los valores del conjunto de fracciones molares, fase vapor y fase líquida de los seis compuestos, analizando se pueden observar los valores fluctuantes que varían en función de las concentraciones en el contexto de la pirólisis catalítica. Cabe mencionar que el software analiza varias iteraciones para generar la convergencia final de resultados, en esta parte se analizan las iteraciones iniciales.

**Tabla 14-4:** Datos simulación fondo.

Fondo	Fracción molar	Fase vapor	Fase líquida
1-Tridecene	0,343	0,421	0,343
1-Dodecene	0,389	0,294	0,389
2335-Mhexane	0,041	0,085	0,041
233-Mhexane	0,128	0,083	0,128
4-Mheptane	0,073	0,080	0,073
4M-1-pentene	0,026	0,037	0,026

Fuente: Orna, Johana. 2021

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

#### 4.1.5 Optimización de condiciones en la simulación

Una vez colocados los valores correctos en las ventanas de ingreso de parámetros, mismos que el programa los da por aceptables al colocar el esquema o gráfico del sistema en color azul; se procede a la optimización de dichos parámetros y del proceso en general, por medio de variar el número de platos y la relación de reflujo, con el fin de que exista una convergencia de los resultados hasta que el comportamiento del resultado final; sea de tipo lineal o cero variación, esto ya es un indicativo de que se ha determinado el resultado final. Cabe detallar que este procedimiento corresponde al método corto de cálculo, así como del caso número uno.

**Tabla 15-4:** Optimización de la simulación.

Variables	Caso#1	caso#2	caso#3	caso#4
P condensador (kPa)	1517			
P Hervidor (kPa)	1725			

# Numero e platos	3	7		
Plato de alimentación	2		3	
Relación de reflujo	0,2			2,5
Condensador	Total			
Caudal del destilado kg/h	39,65			

Fuente: Simulador DWSIM

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

En la tabla 15-4 se presentan los valores resultantes de los cuatro casos analizados para esta etapa del cálculo, en donde se puede apreciar la variación de la fracción molar a medida que se van variando los parámetros de relación molar y el número de platos de alimentación, así como la relación de reflujo. Estos resultados se detallan en el destilado y en el residuo.

**Tabla 16-4:** Resultados destilado y fondo según optimización.

		Caso#1		Caso#2		Caso#3		Caso#4		
		Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	Destilado	Fondo	
	T °C	245,10	332,00	237,30	344,48	251,29	323,75	241,34	338,14	
Zi	kmol/h	0,330	0,403	0,342	0,392	0,322	0,411	0,336	0,397	
0,08	C13H26	0,021	0,128	0,011	0,141	0,030	0,119	0,013	0,137	
Hk	0,26	C12H24	0,102	0,389	0,055	0,439	0,133	0,360	0,074	0,417
	0,07	C10H22	0,067	0,073	0,060	0,079	0,068	0,071	0,067	0,073
	0,39	C9H20	0,448	0,343	0,469	0,321	0,437	0,353	0,467	0,325
Lk	0,04	C8H18	0,058	0,026	0,068	0,015	0,054	0,029	0,062	0,022
	0,16	C6H12	0,305	0,041	0,338	0,005	0,278	0,068	0,317	0,027

Fuente: Simulador DWSIM

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

## 4.2 Resultados finales

### 4.2.1 Variables y parámetros optimizados para la simulación final

Una vez realizados todos los cálculos previos, y haber analizado todas las variables en la optimización, se presentan los valores finales en la tabla 16-4. Donde los parámetros como: presión de condensador, presión del hervidor, número de platos, relación de flujo y finalmente el caudal del destilado; son los valores finales acordes a la mejor compilación con los mejores resultados del simulador.

**Tabla 17-4:** Variables para la simulación óptima.

Variables	Caso#1
P condensador (atm)	0.20
P Hervidor (atm)	0.30
# Numero e platos	4
Plato de alimentación	2
Relación de reflujo	3
Condensador	Total

Fuente: Simulador DWSIM

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

#### 4.2.2 Resultados finales de la simulación

En la tabla 17-4 se presentan los flujos másicos de cada uno de los seis compuestos analizados, donde existen tres grupos de resultados correspondientes a la alimentación, fondo y destilado de la torre de fraccionamiento, donde analizando los resultados el 233-Mhexane se divide en dos partes iguales tanto en el fondo como en el destilado, lo que supone que el compuesto con una mayor presencia másica en kilogramo por cada hora en el destilado fue el 4M-1-Pentene.

**Tabla 18-4:** Resultados de la simulación a condiciones óptimas.

Resultados			
Compuesto	Alimentación Kg/h	Fondo Kg/h	Destilado Kg/h
1-Tridecene	10,70	10.6961	0,0014
1-Dodecene	32,09	32.0717	0,0210
2335-Mhexane	7,30	6.1870	1,1167
233-Mhexane	36,68	20.6132	16,0676
4-Mheptane	3,35	0.4302	2,9205
4M-1-pentene	9,87	0.0011	9,8735

Fuente: Simulador DWSIM

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

El éxito de la destilación multicomponente es la recuperación del mayor porcentaje de clave ligero en el destilado, y el mayor porcentaje del clave pesado en el fondo. En este caso según cálculos previos y la determinación del porcentaje de recuperación, se obtuvo un valor del clave ligero de 87.16 por ciento. Así también el porcentaje obtenido del clave pesado fue de 99.93 por ciento.

$$\% \text{ de recuperación del HL}(4 - \text{methylheptane}) = \frac{2.9205 \text{ Kg/h}}{3.3507 \text{ Kg/h}} * 100$$

$$\% \text{ HL} = 87.16\%$$

$$\% \text{ de recuperación del HK}(1 - \text{dodecene}) = \frac{32.0717 \text{ Kg/h}}{32.0927 \text{ Kg/h}} * 100$$

$$\% \text{ HK} = 99.93\%$$

#### 4.2.3 Propiedades físico – químicas de los compuestos simulados

En la tabla 18-4 podemos observar como resultado las propiedades que utilizó el simulador para los cálculos de los compuestos ya simulados. En la misma observamos que proporciona los parámetros de alimentación, fondo y destilado, así como datos físico químicos como entalpías, entropías, peso molecular y varios más propios de una destilación fraccionaria.

**Tabla 19-4:** Resultados propiedades simulación final.

Propiedades			
Name	Alimentación	Fondo	Destilado
Molecular Weight	136,37	153,11	108,64
Molar Density [kgmole/m <sup>3</sup> ]	0,08	4,35	6,46
Mass Density [kg/m <sup>3</sup> ]	10,71	666,28	701,72
Act. Volume Flow [m <sup>3</sup> /h]	9,34	0,11	0,04
Mass Enthalpy [kJ/kg]	-1327,71	-1435,81	-1763,19
Mass Entropy [kJ/kg-C]	3,43	3,06	2,46
Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	330,54	377,55	219,78
Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,42	2,47	2,02
Phase Fraction [Vol. Basis]	0,33	0,00	0,00
Phase Fraction [Mass Basis]	0,32	0,00	0,00
Phase Fraction [Act. Vol. Basis]	0,99	0,00	0,00
Mass Exergy [kJ/kg]	70,62	32,67	-0,04
Avg. Liq. Density [kgmole/m <sup>3</sup> ]	5,44	4,93	6,56
Specific Heat [kJ/kgmole-C]	330,54	377,55	219,78
Std. Gas Flow [STD m <sup>3</sup> /h]	17,34	10,81	6,53
Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m <sup>3</sup> ]	741,83	755,26	712,28
Act. Liq. Flow [m <sup>3</sup> /s]	0,00	0,00	0,00
Avg. Liq. Density [kgmole/m <sup>3</sup> ]	5,44	4,93	6,56
Specific Heat [kJ/kgmole-C]	330,54	377,55	219,78
Std. Gas Flow [STD m <sup>3</sup> /h]	17,34	10,81	6,53
Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m <sup>3</sup> ]	741,83	755,26	712,28
Act. Liq. Flow [m <sup>3</sup> /s]	0,00	0,00	0,00
Avg. Liq. Density [kgmole/m <sup>3</sup> ]	5,44	4,93	6,56
Specific Heat [kJ/kgmole-C]	330,54	377,55	219,78
Std. Gas Flow [STD m <sup>3</sup> /h]	17,34	10,81	6,53
Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m <sup>3</sup> ]	741,83	755,26	712,28

Fuente: Simulador DWSIM

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

#### 4.2.4 Validación

La etapa de validación de los resultados de la presente investigación, fue posible con la comparación de dichos resultados con diversas fuentes bibliográficas, relacionadas a los compuestos analizados en la fase líquida del polipropileno, en este sentido el presente proyecto coincide con la investigación de (Tekin, Akalin, Kadi, & Karagöz, 2016). A más de eso en lo referente a la destilación según la investigación de (Wiriyampaiwong & Jamradloedluk, 2017), las temperaturas de destilación al emplear un destilador, fueron similares a las de la presente investigación, finalmente, en la siguiente fuente bibliográfica propuesta por (Hechavarría, Rodney; López, 2018), el autor emplea el paquete termodinámico de Peng-Robinson al igual que el presente trabajo, adicional, de igual forma emplea una relación de reflujo de 3.4; muy similar a la del valor de 3 utilizada en esta investigación.

**Tabla 20-4:** Resultados del porcentaje de error relativo.

Parámetros	Datos reales	Datos calculados	%E relativo
T burbuja	54,73	54,35	0,69

T rocío	86,60	84,67	2,23
N platos	16,00	15,45	3,44
R	1,67	1,62	2,99
		P %Error	2,34

Elaborador por: Orna, Johana. 2021

### 4.3 Discusión

Analizando el presente proyecto de titulación, en todos los cálculos se tomó a la presión con un valor de una atmósfera, esta presión está directamente ligada a las temperaturas de ebullición de los componentes presentes en el líquido pirolítico de polipropileno, hecho que influirá en el proceso de la separación. Resultaría interesante variar la presión para que de esta forma se monitoreen los cambios en las temperaturas de ebullición de los compuestos. Dado que son dos parámetros directamente proporcionales.

Como un resumen de todo el proceso que conllevó el diseño de la torre de fraccionamiento; se obtuvieron los compuestos que se encontraban inmersos en la pirólisis con su respectiva fracción, se determinaron las temperaturas de ebullición a una presión atmosférica, después, se procedió a realizar los cálculos mediante la destilación súbita, en lo cual influyen las volatilidades relativas de cada componente en función de la temperatura, obteniendo así parámetros necesarios para la simulación con el número de platos, relación de reflujo y plato de alimentación, finalmente mediante el simulador DWSIM se simuló y optimizó para encontrar parámetros adecuados para una separación exitosa del líquido de la pirólisis del polipropileno; sin embargo sería interesante realizar el proceso anteriormente detallado pero para otro tipo plástico como el poliestireno, y todos los cambios en el estudio que esto conllevaría.

Una vez ejecutadas todas las etapas del proceso del diseño y simulación de la torre de fraccionamiento, para el líquido pirolítico del polipropileno en el simulador DWSIM; un estudio paralelo a las mismas condiciones, pero en diferentes simuladores como: ASPEN HYSIS y PRO II, enriquecerían a los resultados de la presente investigación, en el sentido de que éstos cuentan con librerías más amplias con relación a los compuestos a simular.

## CONCLUSIONES

Al diseñar y simular la torre de fraccionamiento del producto líquido de la pirólisis del polipropileno, se obtuvieron las condiciones óptimas de la torre como: relación de reflujo de 3, número de plato de 4, temperatura de alimentación de 148.32 °C y como resultado el compuesto con mayor presencia en el destilado; el 233-Mhexane con un flujo masico de 16.06 kg/h.

Se analizaron los criterios que conllevan la identificación de precursores químicos, para la determinación del número de unidades de transferencia de la columna de fraccionamiento, en este sentido fueron necesarios dos criterios principales para su cálculo. En una primera instancia el análisis se basó en la dependencia de las constantes de equilibrio con las temperaturas de ebullición, esto trazaría el camino de cálculo a seguir. En una segunda instancia se determinaron las temperaturas de burbuja, rocío y alimentación; en base a los criterios expuestos y que para este caso las constantes fueron independientes de la temperatura se concluye que; el método corto (destilación súbita) se alinea a las condiciones del problema, esto implicó el no calcular las temperaturas de cada plato ni las composiciones de las corrientes intermedias entre los platos.

Para la sintetización del estado del arte con relación a la identificación de precursores químicos, debido a que el diseño de este tipo de torres de fraccionamiento tiene un espacio amplio de aplicación, especialmente en el análisis de destilación multicomponente, se concluye que el estado del arte planteado por medio del autor (Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot, 2013) provisiona una solución acorde al problema del presente trabajo de titulación, donde en una primera etapa, se planteó una presión de 1 atmósfera para proseguir con la iteración de las gráficas de equilibrio con relación a la presión y temperatura de ebullición. Todo esto como parte del cálculo manual para encontrar las variables de entrada para el simulador. Además, tomando en cuenta que para la determinación de los compuestos principales presentes en la fase líquida de la pirólisis catalítica del polipropileno; fue necesario discriminar aquellos compuestos que presentaban en su estructura molecular oxígeno, debido a que la pirólisis es una degradación térmica en ausencia de oxígeno.

Se determinaron las condiciones óptimas de fraccionamiento de la alimentación empleando el software DWSIM, como herramienta de simulación en la identificación de precursores químicos, para la obtención de una simulación eficiente, fue necesario optimizar y encontrar las condiciones requeridas por el programa para funcionar tales como: número de platos, plato de alimentación y relación de reflujo. En este sentido y una vez estabilizados los valores de dichas condiciones se pudo alcanzarse un 87.16% del componente clave ligero, así un 99,93% del componente clave

pesado en el fondo, según estos datos se concluye que la simulación fue exitosa, dado que estos porcentajes son indicativos de una simulación optimizada.

Se validó el diseño propuesto comparando teóricamente con resultados de investigaciones análogas, se tomaron los resultados propuestos por:(Journal, Engineering, & Communication, 2018); específicamente los de las temperaturas de rocío y burbuja, así como el número de platos. Estos parámetros optimizados por el autor fueron calculados con los modelos matemáticos de la presente investigación, obteniendo como resultados que la relación de reflujo obtenida arrojó un 2.34% de error relativo, con relación a los parámetros obtenidos en el presente trabajo, por lo cual y sabiendo que el error al ser menor al 5% es satisfactorio; se concluye que los resultados fueron exitosamente validados.

## RECOMENDACIONES

Si bien en el presente trabajo de titulación se han ejecutado etapas de análisis y cálculo en el software DWSIM, se recomienda para futuras investigaciones ejecutar el diseño, pero en otro software análogo. Con el fin de comparar los resultados y enriquecer la investigación, en este sentido programas como ASPEN HYSYS y PROII, mismos que a más de un buen motor de cálculo poseen librerías completas.

Se recomienda en futuras investigaciones tener la cautela necesaria al momento de seleccionar el paquete termodinámico, dado que cada paquete emplea ecuaciones que dependen directamente de los compuestos a analizar. Al seleccionar de forma errónea el simulador compilará de forma normal, pero la diferencia radicará en la veracidad de los resultados. Los paquetes termodinámicos enfocan su cálculo mayorando aspectos de compuestos según su fracción global.

Se recomienda discriminar de forma objetiva los compuestos prioritarios para el análisis, diseño y simulación, a partir de los resultados de cromatografías, dado que es un análisis determinante en el éxito del estudio; una selección deficiente desembocaría en una falta de veracidad en los resultados obtenidos.

La implementación tomada puede tener límites falsos para las variables de repetición, lo que a su vez puede generar sesgos, especialmente por complejidades de la columna de destilación o problemas de estimación inicial. Por esta razón, le recomendamos que realice un estudio de optimización y refuerce el algoritmo utilizando técnicas que proporcionan garantías matemáticas y computacionales más rigurosas.

Realizar un preprocesamiento de datos adecuado para evitar el uso de datos atípicos o datos mal recopilados que puedan afectar al resultado de la simulación, además de puede realizar un análisis de sensibilidad.

## BIBLIOGRAFÍA

- Aveva Group. (2019). *Product datasheet PRO/II Process Engineering: comprehensive process simulation*.
- C.J.Geankoplis. (1998). *Proceso de transporte y operaciones unitarias* (Tercera). Mexico.
- Campanario, F. J. (2016). *Estudio termodinámico y experimental del reformado con agua supercrítica de compuestos modelo presentes en la fracción acuosa del bio-oil*.
- García, O., Rodríguez, M., & Solís, P. (2013). *Parametrización, Simulación y Propuesta de Monitoreo de una Torre de Destilación binaria para la obtención de Oxígeno y Nitrógeno*.
- Hechavarría, Rodney; López, G. (2018). *Proposición mediante simulación, de mejoras de diseño y funcionamiento para una torre de refinamiento de crudo*. *Journal of Chemical Information and Modeling*.
- Helamán, C., & Romero, G. (2013). *FACULTAD DE QUÍMICA Criterios de Diseño para la Simulación de una Torre de Destilación Atmosférica para Procesar Crudo Istmo y Maya*. César Helamán González Romero.
- Journal, I., Engineering, O. F., & Communication, G. M. (2018). International journal of engineering sciences & research technology a comprehensive study on 5. *Int. J. Eng. Sci.*, 7(7), 247-253. Recuperado de <http://www.ijesrt.com>
- Martínez Sifuentes, V. H., Alonso Dávila, P. A., López Toledo, J., Salado Carbajal, M., & Rocha Uribe, J. A. (2000). *Simulación de procesos. Simulación de procesos en ingeniería química*.
- Montoya, A. (2012). *Diseño de una columna de destilación para recuperación de una sustancia termosensible*. Recuperado de [http://opac.pucv.cl/pucv\\_txt/txt-3000/UCF3374\\_01.pdf](http://opac.pucv.cl/pucv_txt/txt-3000/UCF3374_01.pdf)
- Monzó Pérez, M. R. (2015). Investigación de la influencia del tipo de gas utilizado en el plasma atmosférico, en la modificación superficial del polipropileno, 275.
- Pássaro, C., Rivera, C., Román, M., Cardona, L., Muñoz, L., Gómez, D., ... Rojas, L. (2016). *Guía Sobre Principios Básicos De Cromatografía Y Sus Aplicaciones. Guía Sobre Principios Básicos De Cromatografía Y Sus Aplicaciones*. Recuperado de [https://repositorio.sena.edu.co/bitstream/11404/4694/1/guia\\_cromatografia.pdf](https://repositorio.sena.edu.co/bitstream/11404/4694/1/guia_cromatografia.pdf)
- Rejas, L., Carreón, B., Ortiz, M., Llanes, L., & Copa, M. (2015). Generación de combustibles líquidos a partir de residuos plásticos. *Revista Ciencia, Tecnología e Innovación*, 10, 635-642. Recuperado de [http://www.revistasbolivianas.org.bo/pdf/rcti/v10n11/v10n11\\_a05.pdf](http://www.revistasbolivianas.org.bo/pdf/rcti/v10n11/v10n11_a05.pdf)
- Rodgers, T. (2019). *Advanced Engineering Separations - PRACTICE*.
- Rodríguez, F. (2015). *Simulación de un Proceso de Pirólisis de Plásticos empleando ASPEN – HYSYS*.
- Sinnott, R., & Towler, G. (1967). *Diseño en ingeniería química. Angewandte Chemie International Edition*, 6(11), 951–952.
- Siqueira, A. J. B., Machado, G. F., Costa, J. do C., Branco, L. de F., Montessor, M., Nonato, S.

- de O., & Silva, E. A. D. A. (2019). *Diseño y simulación y una columna de destilación multicomponentes para obtener productos derivados de petróleo*. *Journal of Chemical Information and Modeling*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- Soave, G., & Coto García, B. (2007). SRK, después de muchos años: ¿Qué se puede mantener y qué se debe cambiar? *Anales de la Real Sociedad Española de Química*, (4), 14-21.
- Taipe, J. (2020). Obtención De Combustibles a Partir De Residuos De Polipropileno Reciclado, Mediante Pirólisis Catalítica. *Universidad de las Fuerzas Armadas*, 53(9), 1689-1699.
- Tekin, K., Akalin, M. K., Kadi, C., & Karagöz, S. (2016). Catalytic degradation of waste polypropylene by pyrolysis. *Journal of the Energy Institute*, 85(3), 7. <https://doi.org/10.1179/1743967112Z.00000000029>.
- Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot, R. H. C. (2013). *Operaciones unitarias en ingeniería química*. *Journal of Chemical Information and Modeling* (Vol. 53).
- William J. Kissel , J. Han, J. A. M. (2004). *Polipropileno: estructura, propiedades, procesos de fabricación y aplicaciones*.
- Wiriyaumpaiwong, S., & Jamradloedluk, J. (2017). Distillation of Pyrolytic Oil Obtained from Fast Pyrolysis of Plastic Wastes. *Energy Procedia*, 138, 111-115. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.10.071>
- Zavala, J. (2015). *Modelado y simulación de un proceso de despolimerización vía pirólisis catalítica: polietileno de alta densidad (PEAD)*.

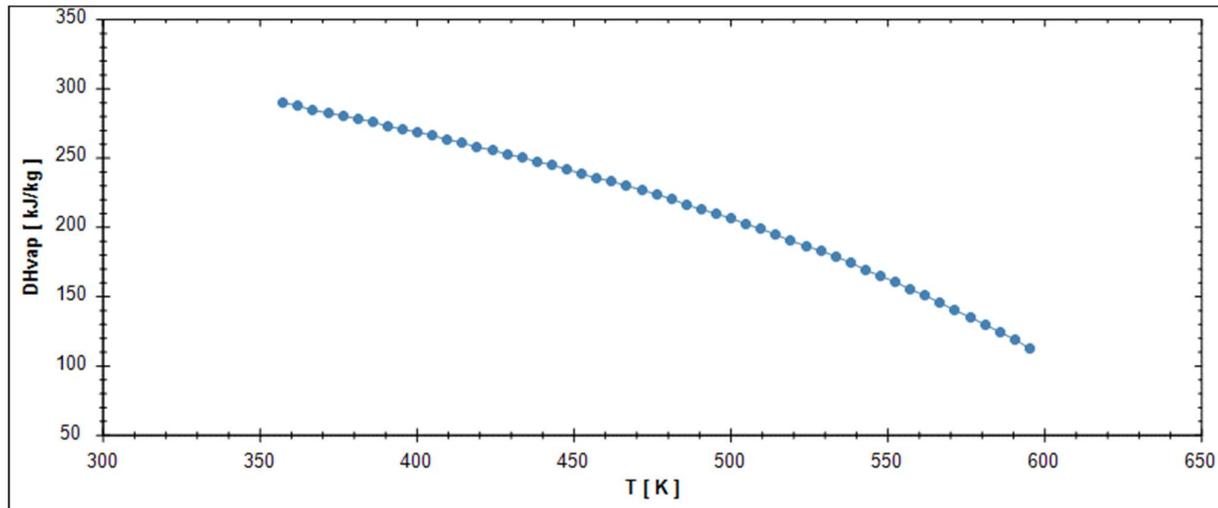
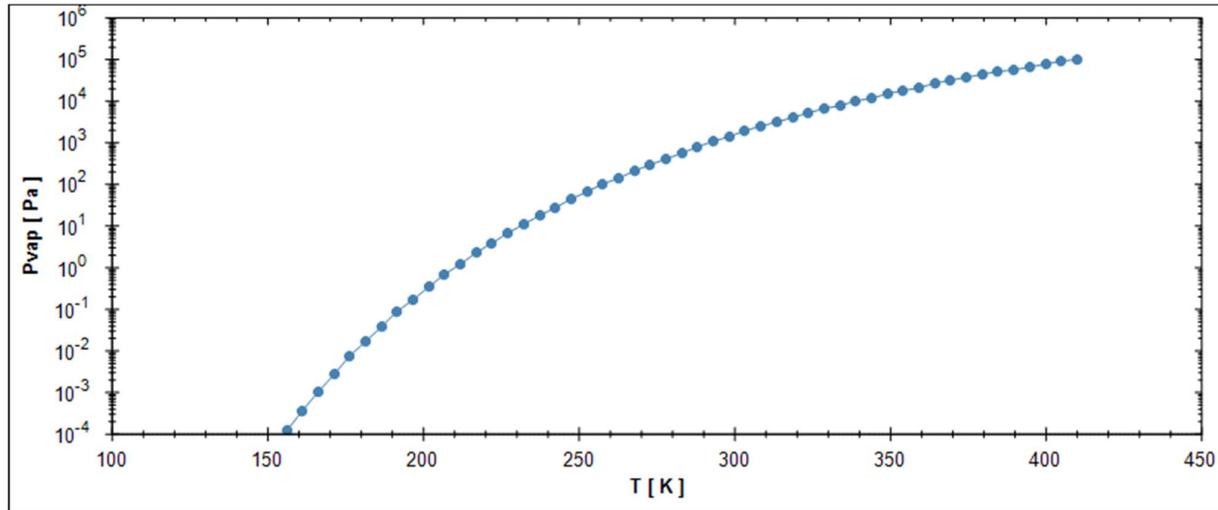
## ANEXOS

### ANEXO A: Hoja de cálculo método corto.

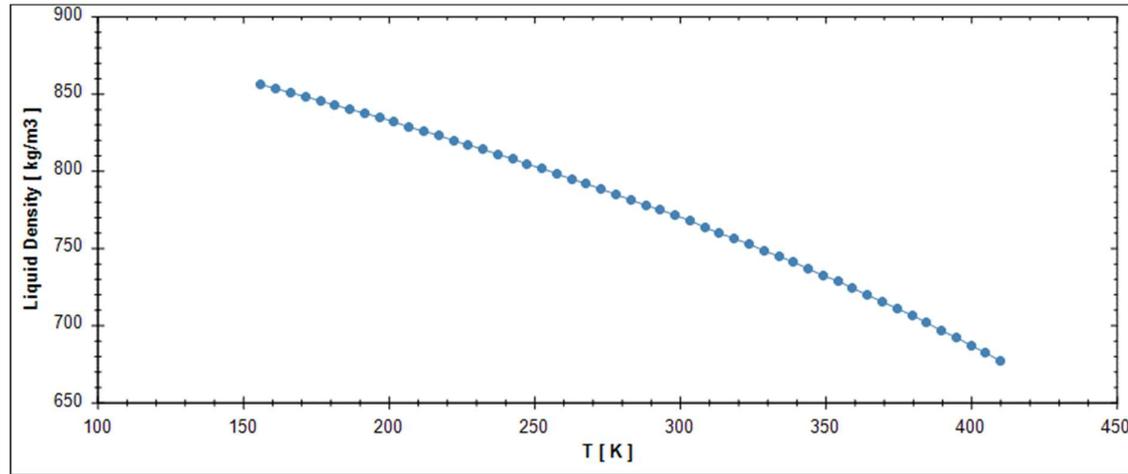
Datos de entrada			Convertidor					Ecuaciones						
Presión	Temperatura	Alimentación	atm	Psi	Kpa	mmHg	bar	Balance general	F = L + V					
1 atm	148,32 C	100 kg/h	0,42167283	6,1985306	55,3761844	320,4713508	0,427253935	Balance componentes	F' = L' + V'					
			C	K	F			Ley Raoult	y <sub>i</sub> = K'x <sub>i</sub>					
			0	273,15	32			Constante K	K = P <sub>sat</sub> /P <sub>oic</sub>					
Temperatura para vapor	V (fracción vapor)	0,337		V	39,67507194				a <sub>i</sub> '/k <sub>i</sub> '(1+V*(K <sub>i</sub> '-1))=y <sub>i</sub>					
				L	60,32492806									
<b>Constantes de Antoine</b>														
Código	Componentes	Zi	A	B	C	Prep atm	Ki	ZiKi	yi	xi				
415	2,3,3-Trimethylhexane	0,39	6,85417	1389,79	212,1	1,31007262	1,310072625	0,510928324	0,454956616	<b>0,34728</b>				
566	1-dodecene	0,26	6,97522	1619,862	182,271	0,1564821	0,156482104	0,040685347	0,06115029	<b>0,39078</b>				
259	4-Methylpent-1-ene	0,16	6,83529	1121,302	229,687	9,72972334	9,72972334	1,596755734	0,348772792	<b>0,03585</b>				
585	Tridec-1-ene	0,08	6,98563	1674,741	175,214	0,08479492	0,084794922	0,006783534	0,010651094	<b>0,12561</b>				
514	2,3,3,5-Tetramethyl hexane (C10H22)	0,07	6,85043	1429,2	206,3	0,88340625	0,88340625	0,061838438	0,064837744	<b>0,07340</b>				
347	4-methylheptane	0,04	6,90065	1327,661	212,568	2,19246812	2,19246812	0,087698725	0,059532941	<b>0,02715</b>				
		1 = 1							<b>1,000</b>	<b>1,000</b>				
<b>Resolución de la ecuación de Rachford-Rice</b>														
$f(W) = \sum_{i=1}^C \frac{z_i(K_i-1)}{1+W(K_i-1)} = 0$														
Componente	Caudal de Alimentación (kmol/h)	xi	T ebullición a 1atm (°C)	Pi' a 111,62 °C (atm)	aij	xi aij	yi=(xi aij)/zi aij	Pi=yi*P (atm)	Pi'=Pi/zi (atm)	T ebullición (°C)	Pi' a 111,62 °C (ATM)	K	aij con respecto a HK	
HK	2,3,3-Trimethylhexane	38,52	137,7	0,478818519	1	0,39	0,19	0,186744462	0,478831955	111,62	0,478831955	0,478831955	12,51822368	
	1-dodecene	25,58	213,4	0,038249717	0,07988354	0,02076972	0,01	0,009945206	0,038250791		0,038250791	0,038250791	1	
	4-Methylpent-1-ene	16,20	53,86	4,668297205	3,74361707	1,559398732	0,75	0,746348513	4,668428205		4,668428205	4,668428205	122,0478873	
	Tridec-1-ene	8,25	232,7	0,018454608	0,03854197	0,003083357	0,00	0,00147641	0,018455126		0,018455126	0,018455126	0,482476369	
	2,3,3,5-Tetramethyl hexane (C10H22)	7,47	153,1	0,303818365	0,63451674	0,044416172	0,02	0,021267892	0,303826890		0,30382689	0,30382689	7,343022454	
LK	4-methylheptane	3,38	117,7	0,840414587	1,75518397	0,070207359	0,03	0,033617527	0,840438171		0,840438171	0,840438171	21,9717855	
		100	111,62		xi aij =	2,088415339	1		TB	111,6208772				
<b>TR supuesto</b>														
			185,0140257										$\alpha_{L,gras} = \sqrt{\alpha_{LD} \alpha_{LH}}$	14,76258
Componente	Caudal de Alimentación (kmol/h)	yi	Pi' a 185 °C (atm)	aij	yi aij	i=(yi aij) / (yi aij)	Pi=yi*P (1ATM)	Pi' recalculada=Pi/zi (atm)	T rocío a Pi' recalculada	Pi' a 185,014atm	K	aij con respecto a HK		
HK	2,3,3-Trimethylhexane	38,52	2,375987583	1	0,39	0,13	0,390	2,37598585	185,013937	2,375985845	2,375985845	6,160165336		
	1-dodecene	25,58	0,483101901	0,162333305	1,60164239	0,54	0,26	0,48310162	185,013937	0,483101619	0,483101619	1		
	4-Methylpent-1-ene	16,20	17,80721278	5,983631412	0,02673961	0,01	0,16	17,80720238	185,013937	17,80720238	17,80720238	36,8601588		
	Tridec-1-ene	8,25	0,285563431	0,09395531	0,83371623	0,28	0,08	0,28556343	185,013937	0,285563431	0,285563431	0,591104273		
	2,3,3,5-Tetramethyl hexane (C10H22)	7,47	2,10328532	0,706752119	0,09904463	0,03	0,07	2,103284304	185,013937	2,103284304	2,103284304	4,353709307		
LK	4-methylheptane	3,38	4,791790484	1,61015137	0,02494238	0,01	0,04	4,79178769	185,013937	4,791787686	4,791787686	3,91879655		
		100		xi aij =	2,37598585	1		TR	185,013937					



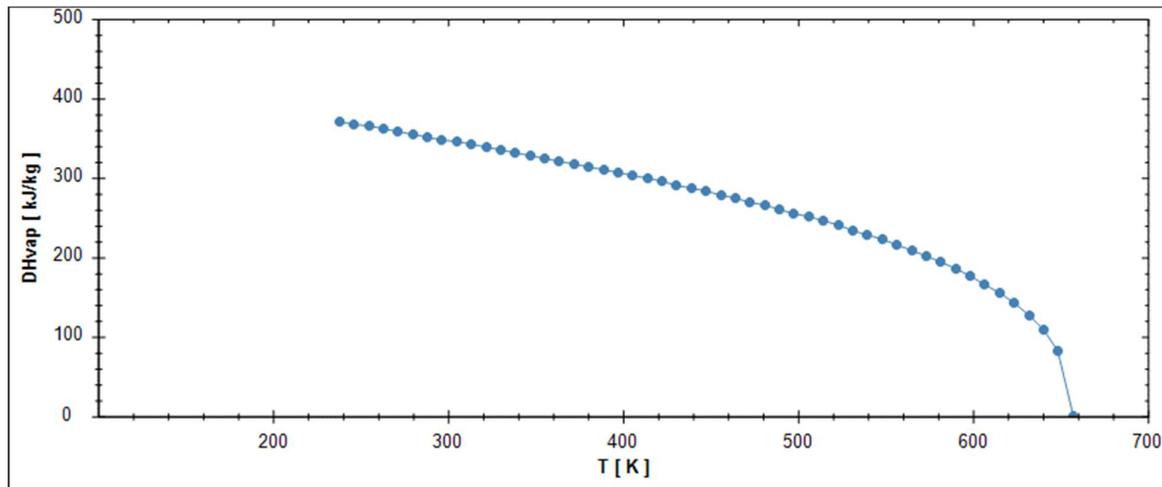
ANEXO B: Propiedades Trimethyl Hxane



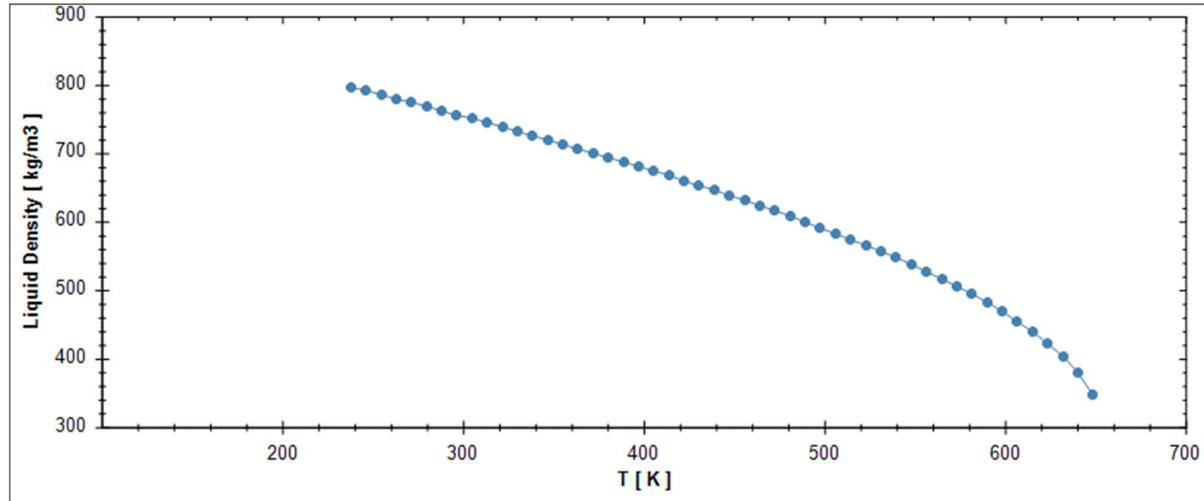
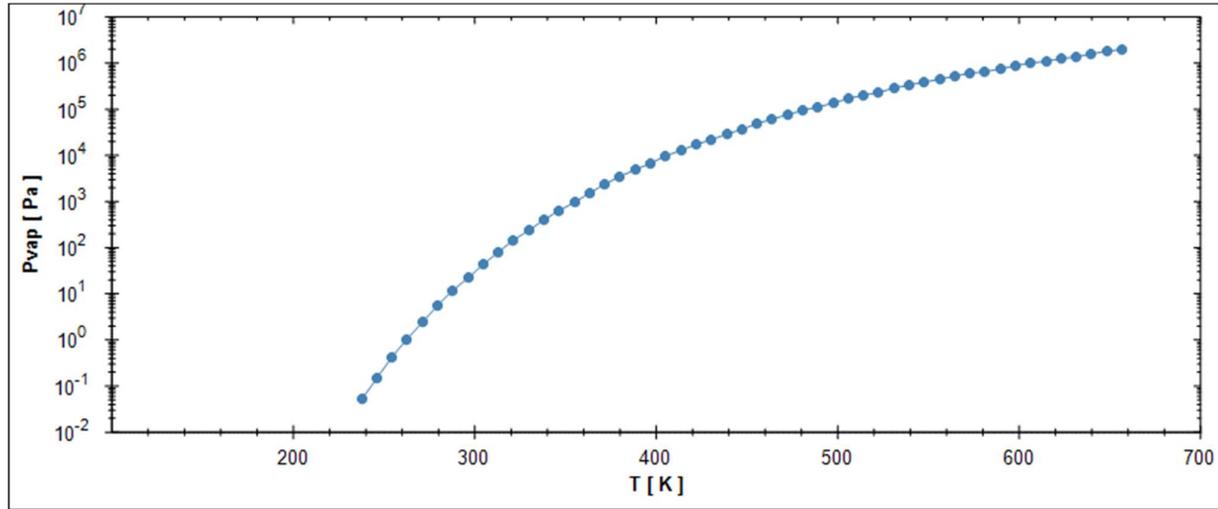
**ANEXO B:** Continuación.



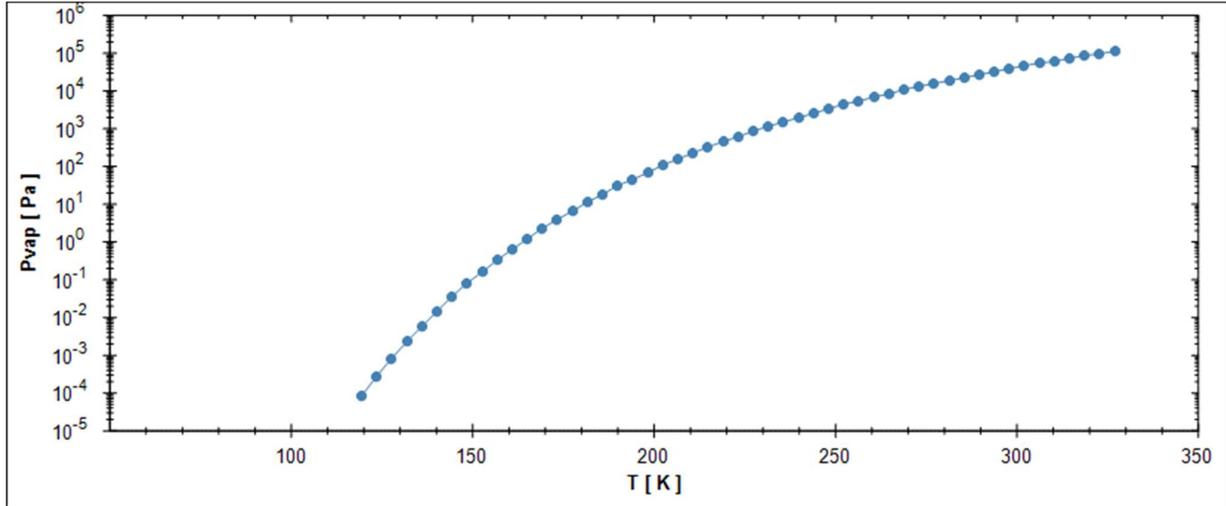
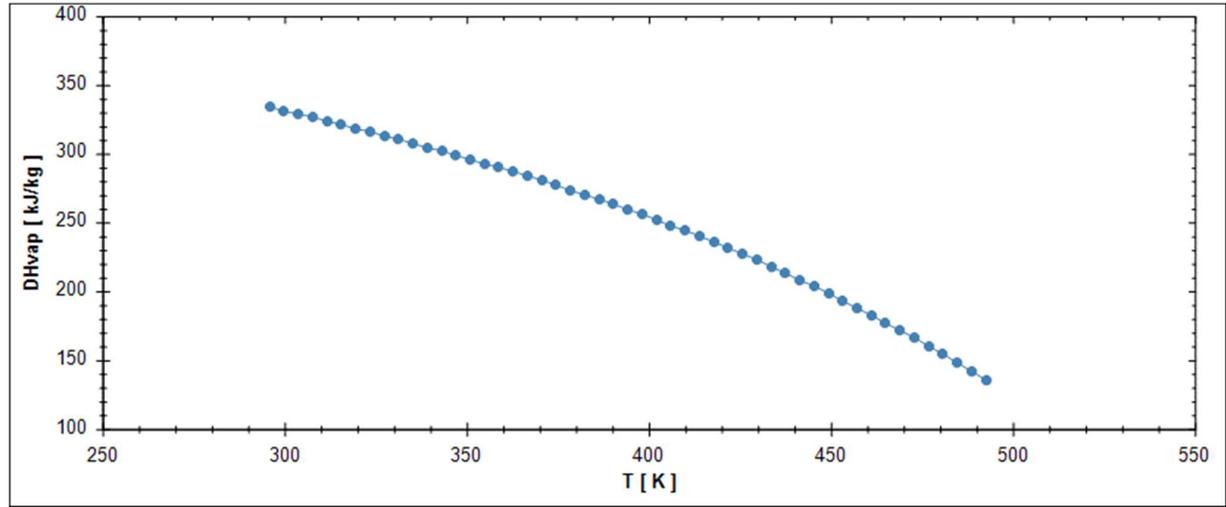
**ANEXO C:** Propiedades Dodecene



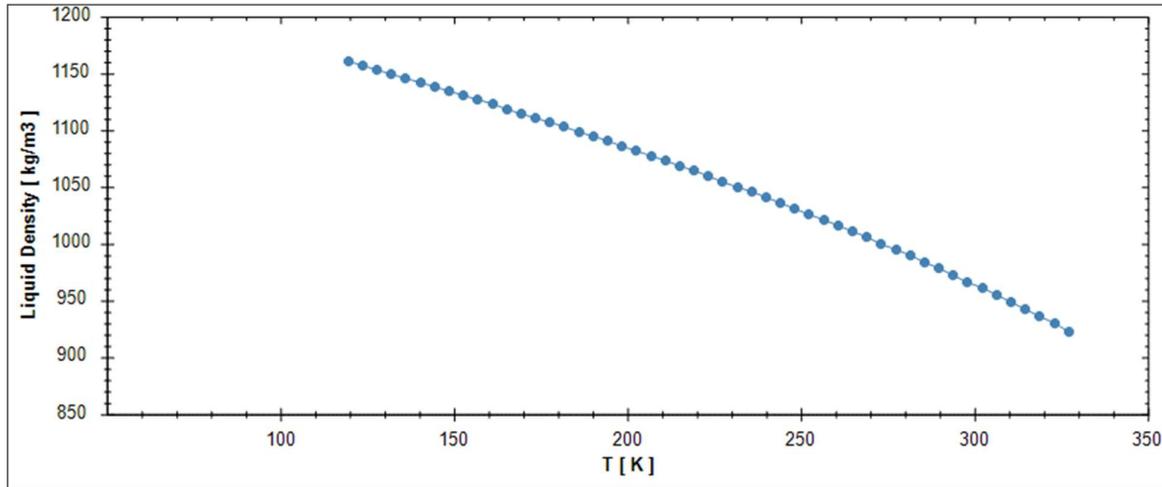
ANEXO C: Continuación.



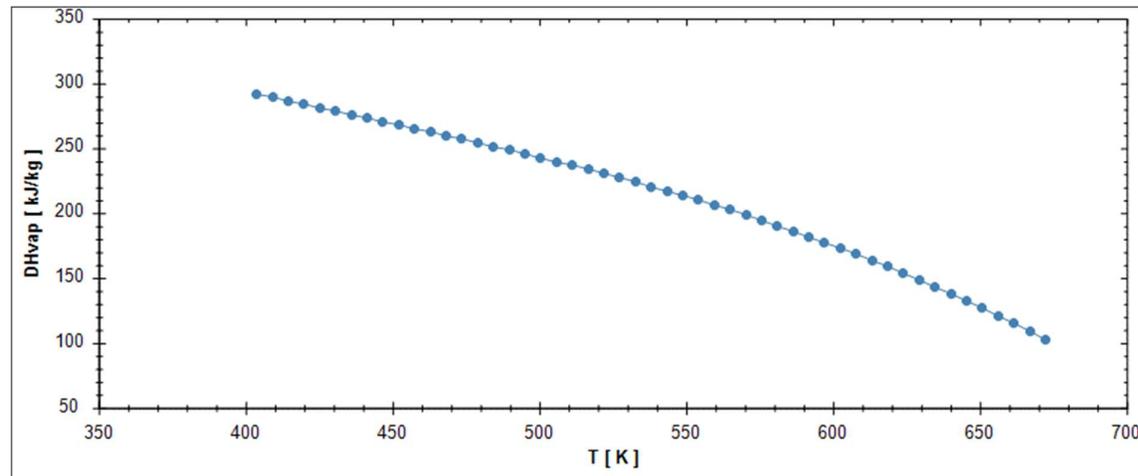
ANEXO D: Propiedades 4 Methylpent-1-ene



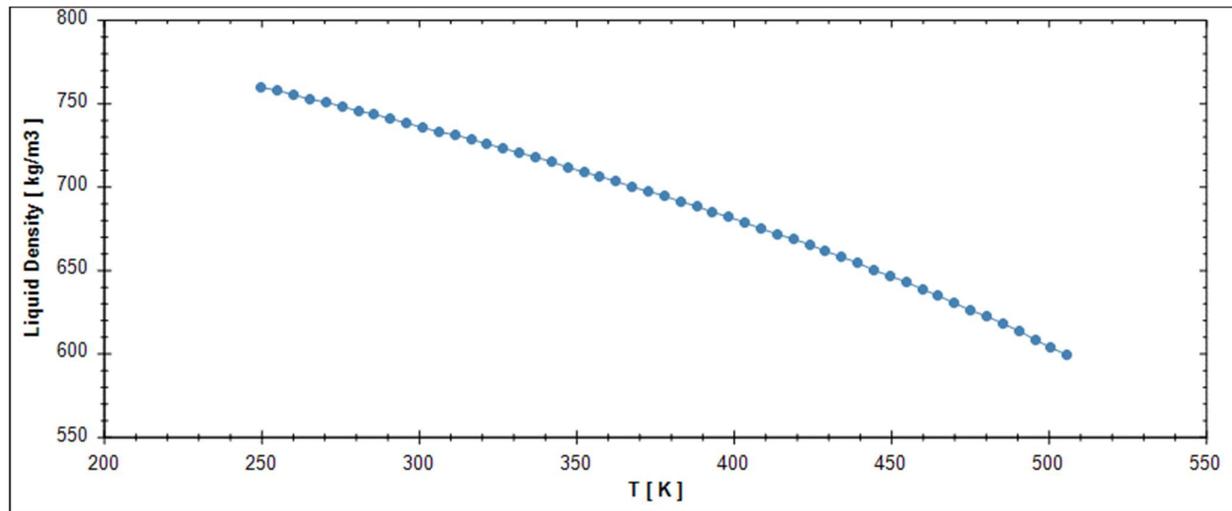
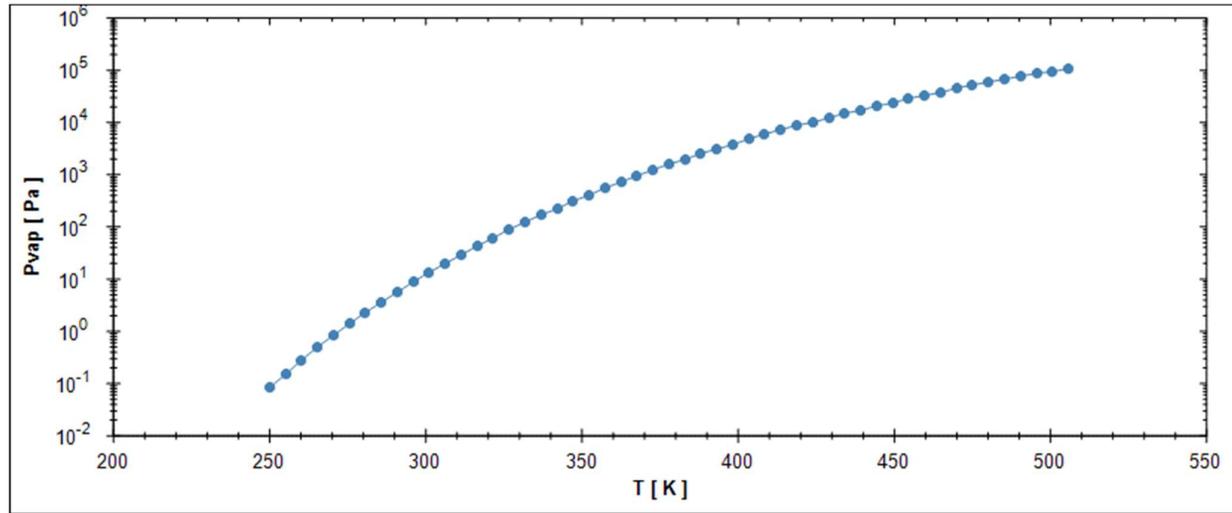
**ANEXO D:** Continuación.



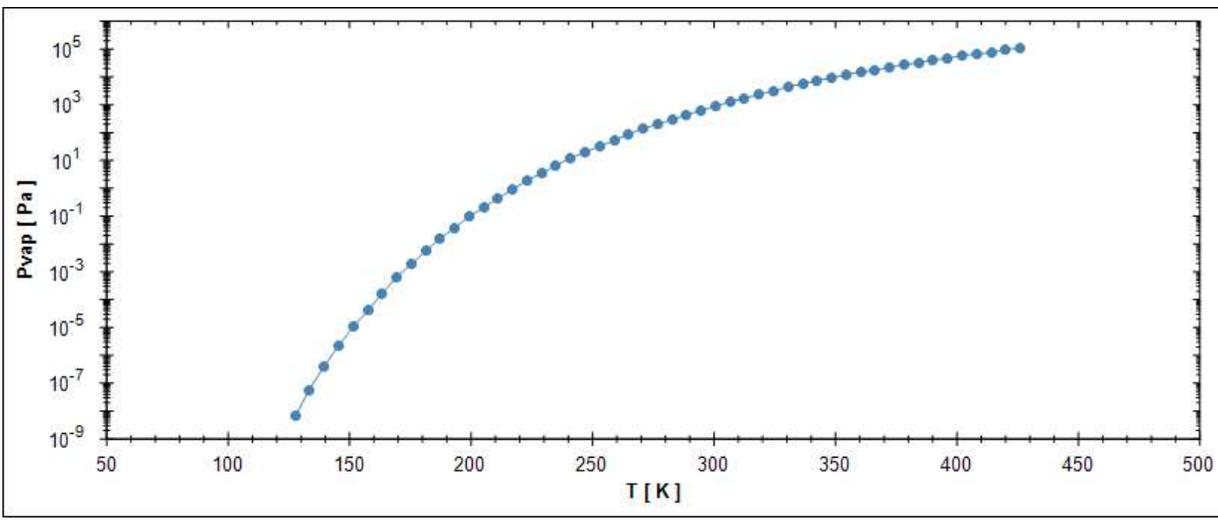
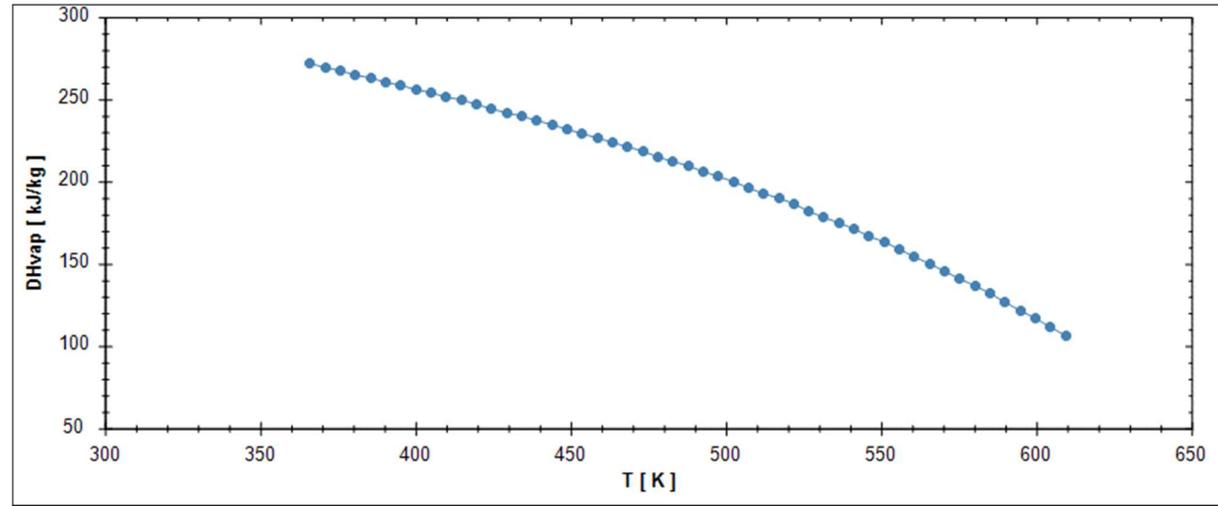
**ANEXO E:** Propiedades Tridec-1-ene



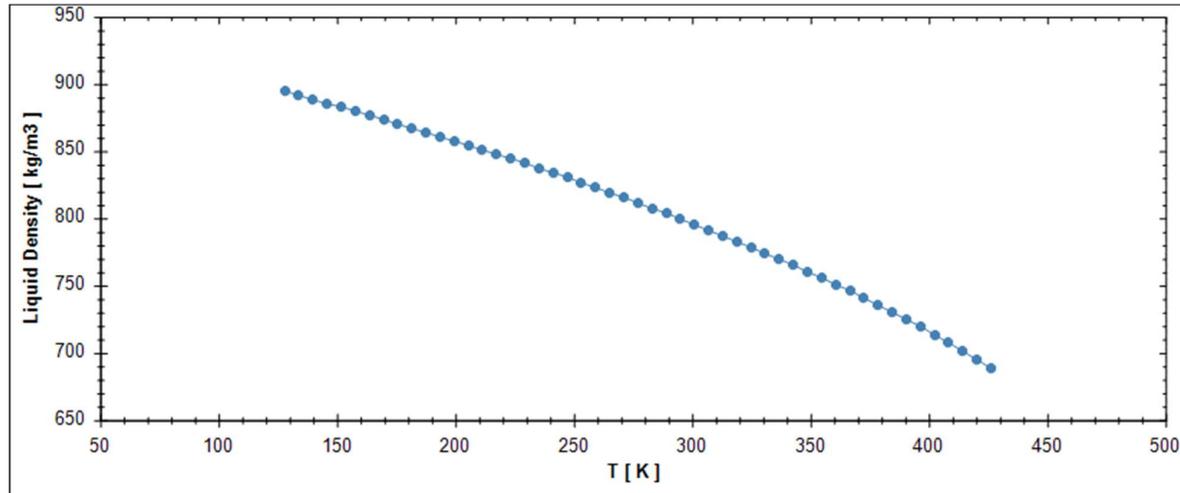
ANEXO E: Continuación.



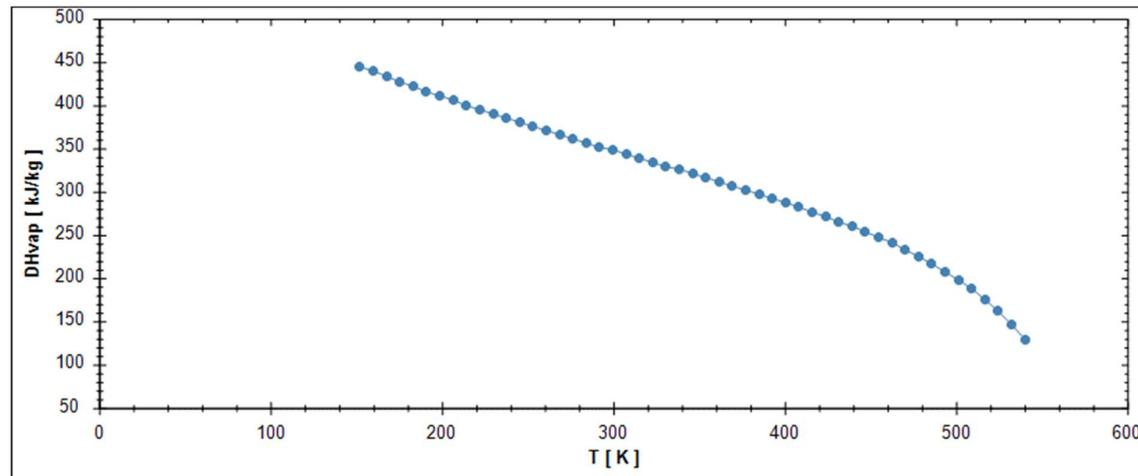
ANEXO F: Propiedades Tetramethyl Hexane



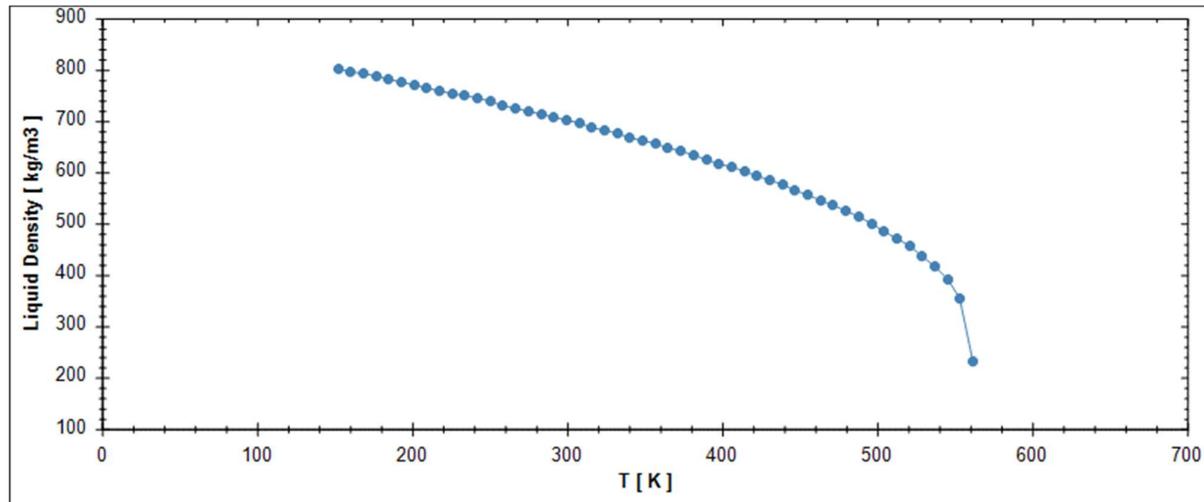
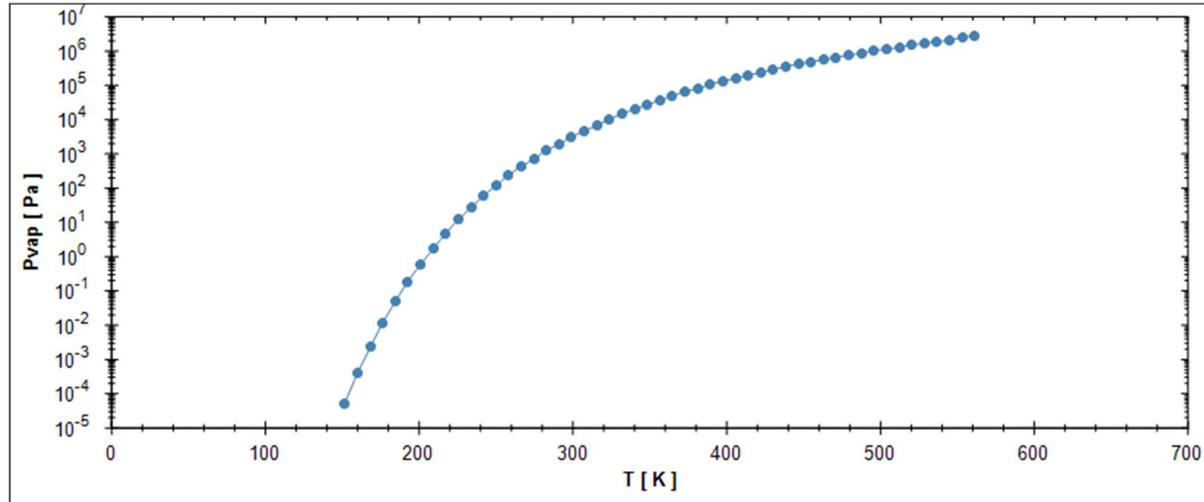
**ANEXO F:** Continuación.



**ANEXO G:** Propiedades 4 Methylheptane



ANEXO G: Continuación.





## Traducción

4  



JOHANA ESTEFANIA ORNA QUINTANILLA

Nombre: Johana Estefania Orna Quintanilla Numero de cedula:0605871276 Programa...

Mar 04/01/2022 15:47



Marca para seguimiento.



JORGE SANTIAGO SANTAMARIA SERRANO

Mié 05/01/2022 12:19

Para: JOHANA ESTEFANIA ORNA QUINTANILLA; Centro de Idiomas

 1    ...



ORNA JOHANA RESUME... 

10 KB

**De:** Centro de Idiomas <idiomas@epoch.edu.ec>

**Enviado:** martes, 4 de enero de 2022 06:49 p. m.

**Para:** JORGE SANTIAGO SANTAMARIA SERRANO <santiago.santamaria@epoch.edu.ec>

**Asunto:** RV: Traducción