



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

**“SIMULACIÓN DEL PROCESO DE DESTILADO EN MÚLTIPLES
ETAPAS Y ÓSMOSIS INVERSA PARA LA DESALINIZACIÓN Y
PURIFICACIÓN DEL AGUA DEL RÍO PERIPA PROVINCIA
SANTO DOMINGO”**

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Propuesta Tecnológica

Presentado para optar al grado académico de:

INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: OSCAR ALBERTO PINCAY AGUIRRE

DIRECTORA: ING. MAYRA PAOLA ZAMBRANO VINUEZA. MSC.

Riobamba - Ecuador

2022

©2022, Oscar Alberto Pincay Aguirre

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.

Yo, OSCAR ALBERTO PINCAY AGUIRRE, declaro que el presente Trabajo de Integración Curricular es de mi autoría, y que los resultados de este son auténticos y originales. Los textos constantes en el documento que provienen de otra fuente están debidamente citados y referenciados.

Como autor, asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Trabajo de Integración Curricular; El patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo

Riobamba, 23 de marzo del 2022



Oscar Alberto Pincay Aguirre

CI. 080383120-5

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular Tipo: Propuesta Tecnológica, “**SIMULACIÓN DEL PROCESO DE DESTILADO EN MÚLTIPLES ETAPAS Y ÓSMOSIS INVERSA PARA LA DESALINIZACIÓN Y PURIFICACIÓN DEL AGUA DEL RÍO PERIPA PROVINCIA DE SANTO DOMINGO**”, realizado por el señor: **OSCAR ALBERTO PINCAY AGUIRRE**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. Iliana Elizabeth Carrera Flores. MSc. PRESIDENTE DE TRIBUNAL	 _____	2022-03-23
Ing. Mayra Paola Zambrano Vinuesa. MSc. DIRECTORA DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 _____	2022-03-23
Ing. Mónica Lilián Andrade Ávalos. MSc. ASESORA DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR	 _____	2022-03-23

DEDICATORIA

Quiero dedicar el presente trabajo de titulación principalmente a Dios, por ser el inspirador y darme la fuerza para continuar en este proceso de obtener uno de los anhelos más deseados. A mi madre Francisca Aguirre Mateus, por su amor, trabajo y sacrificio en todos estos años su infinita fe para que pueda alcanzar tan grande logro que hasta sus últimos días de vida siempre creyó en mí, no está demás mencionar a mi abuelito José Aquiles Pincay Solórzano mi gran consejero, a papá Oscar Pincay Solórzano por su apoyo siempre tan sonriente y noble carácter en todos estos años, mis hermanos Samira y Andrés por acompañarme en cada momento junto con mis abuelitos, tíos, primos, familiares y amigos. A mis docentes que me abrieron las puertas y aportaron con sus conocimientos en lo largo de mi formación académica.

Oscar

AGRADECIMIENTO

Quiero expresar mi gratitud a Dios, quien con su bendición llena siempre mi vida, a mi madre por ser mi pilar fundamental y haberme apoyado incondicionalmente, pese a las adversidades e inconvenientes que se presentaron, quienes me brindaron paciencia y sabiduría para culminar con éxito mis metas propuestas. Agradezco infinitamente a mis hermanos que con sus palabras me hacían sentir orgulloso de lo que soy y de lo que les puedo enseñar, espero algún día yo me convierta en esa fuerza para que puedan lograr alcanzar sus objetivos en el transcurso de su camino, a mis abuelitos tanto paternos como maternos siempre son la base de la familia, mi tía Mariana y Xavier Aguirre estar en esos momentos donde a veces no se tiene salida juntos con mis queridos primos hermanos Joan, Andrea, Guisella y Nicholle. A todos mis docentes que a lo largo de la carrera han compartido su sabiduría, conocimiento y apoyo, motivaron a desarrollarme como persona y profesional en la Escuela Superior Politécnica del Chimborazo.

Oscar

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS.....	xiv
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	xv
RESUMEN.....	xvi
ABSTRACT.....	xvii
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA	3
1.1. Planteamiento del problema	3
1.2. Objetivos.....	3
1.2.1. <i>General</i>	3
1.2.2. <i>Específicos</i>	4
1.3. Justificación del proyecto.....	4
1.4. Alcance.....	5

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO	6
2.1. Estado del arte	6
2.1.1. <i>Introducción a la simulación de procesos</i>	6
2.1.2. <i>Importancia y aplicación de los simuladores en la ingeniería química</i>	6
2.1.3. <i>Tratamiento sostenible de aguas residuales mediante un proceso híbrido de destilación</i>	7
2.2. Bases teóricas	7
2.2.1. <i>Línea de base en la contaminación del río Peripa</i>	7
2.2.2. <i>Índice de calidad de agua</i>	8
2.2.2.1. <i>Parámetros fisicoquímicos del agua</i>	8
2.2.2.2. <i>Parámetros biológicos de la calidad del agua</i>	10
2.2.3. <i>Ósmosis inversa</i>	10
2.2.3.1. <i>Ósmosis inversa en la desalinización</i>	11
2.2.3.2. <i>Modelo de transporte de membrana</i>	12
2.2.4. <i>Membrana</i>	13
2.2.4.1. <i>Tipos de membrana para desalado</i>	13

2.2.5.	<i>Destilación multietapas</i>	14
2.2.6.	<i>Simulación de procesos</i>	15
2.2.7.	<i>DWSIM - Chemical Process Simulator</i>	16
2.2.7.1.	<i>Características DWSIM</i>	16
2.2.7.2.	<i>Interfaz plataforma DWSIM</i>	17
2.2.7.3.	<i>Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos</i>	18
2.3.	Marco Legal	19
2.3.1.	<i>Constitución del Ecuador</i>	19
2.3.1.1.	<i>Normativas aplicables</i>	20

CAPÍTULO III

3.	MARCO METODOLÓGICO	21
3.1.	Etapas de la metodología	21
3.2.	Tipo de estudio	22
3.2.1.	<i>Estudio Descriptivo</i>	22
3.3.	Métodos y Técnicas de recolección de datos	22
3.3.1.	<i>Métodos</i>	22
3.3.2.	<i>Técnicas de recolección de datos</i>	23
3.4.	Localización del proyecto	23
3.5.	Caracterización inicial del agua del río mediante un análisis fisicoquímico	24
3.6.	Establecimiento de los parámetros de operación del proceso a simular	26
3.6.1.	<i>Generalidades del proceso</i>	26
3.7.	Determinación de las variables de estudio	28
3.7.1.	<i>Variables Independientes:</i>	28
3.7.2.	<i>Variables Dependientes:</i>	28
3.8.	Simulación en DWSIM del proceso	28
3.8.1.	<i>Especificaciones iniciales</i>	28
3.8.2.	<i>Especificaciones en la primera columna de destilación</i>	30
3.8.3.	<i>Especificaciones en la segunda columna de destilación</i>	31
3.8.4.	<i>Especificaciones en la tercera columna de destilación</i>	32
3.9.	Validación de los resultados de la simulación	34
3.10.	Análisis de sensibilidad	34

CAPÍTULO IV

4.	GESTIÓN DEL PROYECTO	36
----	-----------------------------------	----

4.1.	Presupuesto	36
4.2.	Materiales	36
4.3.	Cronograma	37
4.4.	Discusión y análisis de resultados.....	37
4.4.1.	<i>Informe de resultados de la simulación en DWSIM</i>	37
4.5.	Validación de los resultados obtenidos en DWSIM.....	39

CAPÍTULO V

5.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	41
5.1.	Conclusiones.....	41
5.2.	Recomendaciones.....	42

BIBLIOGRAFÍA

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-2:	Parámetros fisicoquímicos	8
Tabla 2-2:	Características de DWSIM.....	16
Tabla 3-2:	Leyes y Normativas.....	20
Tabla 1-3:	Características geográficas de la parroquia Puerto Limón	23
Tabla 2-3:	Parámetros de operación iniciales	26
Tabla 3-3:	Condiciones operativas de la primera columna.....	27
Tabla 4-3:	Condiciones operativas de la segunda columna	27
Tabla 5-3:	Condiciones operativas de la tercera columna	27
Tabla 6-3:	Parámetros de operación iniciales	28
Tabla 7-3:	Valores de referencia para el cloro libre residual en cuerpos de agua dulce	34
Tabla 8-3:	Valores de referencia para los TPH en cuerpos de agua dulce.....	34
Tabla 9-3:	Resultados del análisis de sensibilidad.....	35
Tabla 1-4:	Presupuesto para el desarrollo del trabajo	36
Tabla 2-4:	Materiales	36
Tabla 3-4:	Cronograma de actividades	37
Tabla 4-4:	Resultados en la corriente de agua tratada	38
Tabla 5-4:	Resultados en corriente de n-hexano.....	38
Tabla 6-4:	Resultados en la corriente de cloro residual	39
Tabla 7-4:	Concentración de contaminantes en la alimentación de la simulación.....	39
Tabla 8-4:	Concentración de contaminantes en el agua tratada de la simulación.....	39
Tabla 9-4:	Validación de la simulación	40

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1-2:	Mecanismo de la ósmosis inversa	10
Ilustración 2-2:	Comportamiento de solución a través de membrana.....	12
Ilustración 3-2:	Destilado multietapas en desalinización de agua	14
Ilustración 4-2:	Interfaz DWSIM.....	17
Ilustración 5-2:	Paquetes de propiedades.....	18
Ilustración 6-2:	Operaciones de la unidad	19
Ilustración 1-3:	Metodología	21
Ilustración 2-3:	Ubicación geográfica de la parroquia Puerto Limón.....	24
Ilustración 3-3:	Análisis fisicoquímico de agua, TPH fuera del límite permisible.....	25
Ilustración 4-3:	Análisis fisicoquímico de agua, cloro fuera del límite permisible	25
Ilustración 5-3:	Diagrama de flujo del proceso de destilación en múltiples etapas y una membrana de purificación	26
Ilustración 6-3:	Selección de compuestos que intervienen en la simulación.....	29
Ilustración 7-3:	Selección del paquete termodinámico	29
Ilustración 8-3:	Selección del sistema de unidades.....	30
Ilustración 9-3:	Generalidades en la primera columna	30
Ilustración 10-3:	Especificaciones en la primera columna	31
Ilustración 11-3:	Generalidades en la segunda columna.....	31
Ilustración 12-3:	Especificaciones en la segunda columna.....	32
Ilustración 13-3:	Generalidades en la tercera columna.....	32
Ilustración 14-3:	Especificaciones en la tercera columna.....	33
Ilustración 15-3:	Simulación del proceso de tratabilidad	33
Ilustración 16-3:	Variables independientes y sus rangos en el análisis de sensibilidad	35
Ilustración 17-3:	Variables dependientes en el análisis de sensibilidad	35
Ilustración 1-4:	Porcentaje de remoción	40

RESUMEN

El proyecto simulación del proceso de destilado en múltiples etapas brinda una herramienta importante para el control del cuerpo hídrico, ya que el nulo tratamiento de aguas residuales producidas por actividades domésticas e industriales se disponen en un porcentaje mayoritario a ríos, afluentes y lagos agravando más la problemática ambiental por influencia antropogénica. Por lo tanto, el objetivo del presente trabajo fue simular un proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa para la desalinización y purificación del agua del río Peripa mediante un software especializado. La metodología implementada se empezó empleando la caracterización físico-química inicial del agua del río donde se obtuvieron estos datos de la información proporcionada por el Gobierno Autónomo Descentralizado de Puerto Limón y se comparó con la norma en el cual se evidenció que el agua contiene cloro residual e hidrocarburos totales de petróleo fuera de los límites correspondientes permitidos para cuerpos hídricos por lo que se identificó la problemática, para la simulación es importante definir las condiciones de operación inicial como presión de 2 atmósfera, temperatura de 30°C y relación de alimentación de 1:1; donde los equipos inmersos en el proceso de desalinización con tres etapas de destilación y una de osmosis inversa. Con esta metodología se observó que la concentración de contaminantes cloro residual y n-hexano se encuentran por debajo de los valores permisibles de 0,5 miligramos de contaminante por litro de agua dulce. En este contexto se llegó a la conclusión que el proceso de destilación en múltiples etapas y ósmosis inversa podría lograr un 99,99% de la remoción del cloro libre residual y n-hexano expresado como hidrocarburos totales del petróleo (TPH) presentes en el agua del río Peripa. Se recomienda realizar los análisis fisicoquímicos del agua en un periodo de 6 meses para determinar los valores de los contaminantes.

Palabras clave: <TECNOLOGÍA Y CIENCIAS DE LA INGENIERÍA>, <SIMULACIÓN>, <DESALINIZACIÓN>, <CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA >, <ÓSMOSIS>, <DESTILACIÓN>, <OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS>.



0609-DBRA-UTP-2023

ABSTRACT

The simulation project of the multi-stage distillation process provides an important tool for the control of the water body, since the lack of treatment of wastewater produced by domestic and industrial activities is disposed in a majority percentage to rivers, tributaries, and lakes, aggravating the environmental problems due to anthropogenic influence. Therefore, the objective of the present work was to simulate a multi-stage distillation and reverse osmosis process for the desalination and purification of water from the Peripa River using specialized software. The methodology implemented started by using the initial physical-chemical characterization of the river water where the data was obtained from the information provided by the Decentralized Autonomous Government of Puerto Limón and compared with the standard in which it was evidenced that the water contains residual chlorine and total petroleum hydrocarbons outside the corresponding limits allowed for water bodies so the problem was identified; for the simulation is important to define the initial operating conditions such as pressure of 2 atmosphere, temperature of 30°C and feed ratio of 1:1; where the equipment immersed in the desalination process with three distillation stages and one reverse osmosis stage was used. With this methodology, it was observed that the concentration of residual chlorine and n-hexane contaminants are below the permissible values of 0.5 milligrams of contaminant per liter of fresh water. In this context, it was concluded that the multi-stage distillation and reverse osmosis process could achieve 99.99% removal of residual free chlorine and n-hexane expressed as total petroleum hydrocarbons (TPH) present in the water of the Peripa River. It is recommended to perform the physicochemical analysis of the water in a period of 6 months to determine the values of the pollutants.

Keywords: <TECHNOLOGY AND ENGINEERING SCIENCES>, <SIMULATION>, <DESALINATION>, <PHYSICOCHEMICAL CHARACTERIZATION>, <OSMOSIS>, <DISTILLATION>, <PROCESS OPTIMIZATION>.



Abg. Ana Gabriela Reinoso, Mgs
C.I. 1103696132

INTRODUCCIÓN

La principal problemática en la provincia de Santo Domingo de los Tsáchilas tradicionalmente ha sido una de las provincias con mayor movimiento comercial y agrícola del país, por la presencia de las carreteras más importantes del país que cruzan la zona, esta ubicación estratégica la convierten en una conexión entre la costa y la sierra. Esta situación ha provocado que muchas agroindustrias se ubiquen en la provincia, citando entre las principales: la de la palma, palmito, ganadería, frutas, y la avícola - porcícola (Gobierno Provincial Santo Domingo, 2011). La agroindustria de crianza de aves y cerdos se ha asentado en la provincia sobre todo por el acceso a recursos naturales necesarios para esta actividad (agua, suelo), y por las razones geográficas descritas anteriormente. Sin embargo, poco se ha estudiado y visibilizado las condiciones ambientales y sociales que las poblaciones Tsáchilas viven debido a la actividad avícola y porcícola en su territorio. Sobre todo, porque está asentada cerca de recursos naturales necesarios para las actividades tradicionales de pequeña agricultura de los campesinos e indígenas de Santo Domingo, es de esperar que la presencia de la agroindustria genere conflictos y cambios que afecten el futuro de las poblaciones originarias en varios niveles.

Este estudio se enfoca en los impactos a las condiciones sociales y ambientales de la población Tsáchilas, analizando si dichas condiciones ofrecen posibilidades para acceder a la Soberanía Alimentaria que se menciona en nuestra Constitución en el Art. 281. La crisis mundial del agua es la principal responsable de una serie de hechos que han venido afectado de sobremanera al ser humano y a las demás especies que habitan el planeta tierra, como la desnutrición, anemia, enfermedades gastrointestinales, por este motivo la comunidad científica ha desarrollado diferentes propuestas para el tratamiento y descontaminación de cuerpos hídricos, constituyendo en el caso de aguas con alto porcentaje de salinidad la tecnología desalinizadora que provee de agua potable, para llevar a cabo este proceso hay una variedad de tecnologías en el mercado con variabilidad de costos, impacto ambiental, calidad del producto, energía consumida entre otras (Hernandez, 2021, p.21).

La desalinización por ósmosis inversa (OI) se ha convertido en un método de desalinización destacado para la producción de agua dulce a partir de agua de mar salada o agua salobre para satisfacer la demanda cada vez mayor de agua, especialmente en regiones con escasez de agua. Su integración con fuentes de energía renovable (RES) reduce el impacto ambiental de las emisiones de carbono de las fuentes de energía de combustibles fósiles convencionales.

Es evidente que las tecnologías actuales para la desalinización es prometedora y alternativa viable para suministrar agua potable, quizá el mayor problema que ha representado para su

implementación inmediata es los altos costos que esta significa en el mercado siendo este la limitante para países en vías de desarrollo específicamente Ecuador donde la innovación ha ido en decaída.

La desalinización térmica, o destilación, es una de las formas más antiguas de tratar el agua de mar y el agua salobre en agua potable. Los procesos térmicos incluyen el flash multietapa, la ebullición de múltiples efectos y la compresión de vapor, la cogeneración y la destilación solar, mientras que los procesos de membrana incluyen la ósmosis inversa, la electrodiálisis y la destilación por membrana. Se basa en los principios de ebullición o evaporación y condensación. El agua se calienta hasta el estado de evaporación. La sal se queda atrás mientras el vapor se condensa para producir agua dulce. En la actualidad, gran parte de la energía térmica necesaria se produce en generadores de vapor, calderas de calor residual o mediante la extracción de vapor de contrapresión de las turbinas de las centrales eléctricas. Las técnicas especiales de destilación se utilizan comúnmente para la separación de azeótropos y mezclas cercanas al punto de ebullición, como la destilación extractiva y destilación por cambio de presión, destilación azeotrópica.

Las técnicas de desalinización convencionales alimentadas con combustibles fósiles consumen grandes cantidades de energía; tienen un alto impacto ambiental y altos costos. Por lo tanto, las abundantes fuentes de energía renovable baratas y limpias son una alternativa prometedora para impulsar los procesos modernos de desalinización. Los costos de producción de agua se pueden reducir mediante el uso de un sistema híbrido que consta de dos o más métodos de desalinización. Recientemente, han proliferado los dispositivos de recuperación de energía comercialmente disponibles basados en el método de intercambio de presión directa de desplazamiento positivo. Este creciente interés se debe a que la tecnología puede reducir significativamente el consumo de energía de los sistemas de ósmosis inversa de agua salina (SWRO) nuevos y existentes. Dado que los costos de energía están aumentando y pueden consumir hasta el 75% de los costos operativos totales de una planta SWRO, la difusión de esta tecnología en toda la industria es importante (Zapata et al., 2022: p.2). El número de procesos de Ósmosis Inversa (OI) en las principales plantas desaladoras se ha expandido considerablemente en los últimos tiempos. En un sistema de purificación de ósmosis inversa, una membrana semipermeable elimina iones, proteínas y productos químicos orgánicos, lo que a menudo no se logra fácilmente con métodos convencionales. Las ventajas incluyen una pequeña huella de terreno, un diseño modular y la disponibilidad de un control de proceso automático y una producción de agua comparativamente de bajo costo. Las plantas de desalinización de ósmosis inversa se han puesto en servicio con frecuencia para el tratamiento de agua y aguas residuales, particularmente en aquellas áreas donde el agua escasea (Sarai et al, 2018: p.1).

CAPÍTULO I

1. DIAGNÓSTICO DEL PROBLEMA

1.1. Planteamiento del problema

El tratamiento de aguas residuales producidas por actividades domésticas e industriales así como aguas fluviales sumadas forman la llamadas aguas servidas que en zonas rurales se disponen en un porcentaje mayoritario a ríos, afluentes y lagos agravando más la problemática ambiental por influencia antropogénica, que significa que si no se mejora o se implementa métodos para tratar y purificar el agua de las corrientes naturales como el del río Peripa provincia de Santo Domingo de los Tsáchilas afluente que por más de 30 años lleva siendo contaminado por los factores antes mencionados, actualmente la situación del río Peripa no ha cambiado desde el año 2019 arrastra una contaminación por piscinas de oxidación que son utilizadas para tratar aguas servidas que al colapsar evacua contantemente aguas residuales al río ya que las piscinas están construidas en la orilla de la afluente y el grado de contaminación se agravará apresuradamente como ha ido sucediendo en los últimos años por diferentes factores relacionados con la actividad del hombre hacia los ecosistemas que son afectados directamente así como su fauna silvestre y las pérdidas de fuente de agua dulce que se genera a las comunidades Tsáchilas, solo un alrededor del 10% de aguas residuales tienen algún nivel de tratamiento y más del 70% de las cuencas hidrográficas de la región por debajo de los 2800 msnm no es apta para el consumo humano.

Es fundamental atender al uso de un método para la simulación aplicando un estudio de un proceso óptimo de destilado de múltiples etapas en lo que el desarrollo de un modelo de simulación utilizando el software DWSIM que al describir en detalles junto al estudio de caso realizando un modelo de estado estable y dinámico que ayude aportar soluciones ambientales para el agua del río Peripa de la región como lo es mediante purificación porque mientras más se contamina el agua, más costoso resulta su tratamiento por el elevado porcentaje de agua residual que no se trata en la región que es del 90 % y se descargan en las fuentes de aguas dulces.

1.2. Objetivos

1.2.1. General

Simular un proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa para la desalinización y purificación del agua del río Peripa de la provincia de Santo Domingo de los Tsáchilas mediante un software especializado.

1.2.2. Específicos

- Realizar la caracterización inicial del agua del río Peripa mediante un análisis fisicoquímico para encontrar datos reales de la calidad de agua del río.
- Determinar las variables para la simulación del proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa en la desalinización y purificación del agua del río Peripa provincia de Santo Domingo.
- Optimizar el proceso de destilado en múltiples etapas para el tratamiento del agua del río Peripa provincia de Santo Domingo.
- Validar la simulación mediante la determinación del porcentaje de remoción de los contaminantes del río Peripa después del proceso de destilación y ósmosis inversa.

1.3. Justificación del proyecto

Con la simulación del proceso de destilado de múltiples etapas tipo flash y ósmosis inversa se determinara el mecanismo adecuado para la purificación y desalinización del agua del río Peripa de la provincia de Santo Domingo, logrando así una mejora en el sistema de planificación de manejo y tratamiento del agua del río Peripa ,implementando métodos tecnológicos de simulación de las corrientes naturales de aguas como el del río, afluente que por más de 30 años lleva siendo contaminado por factores industriales y domésticos . Para ejecutarlo se utilizara el software libre DWSIM que es un simulador de procesos de código abierto donde el usuario puede acceder al código fuente de la aplicación, adaptarlo a sus necesidades, o corregir errores para desarrollar un estudio con un estándar de ingeniería de procesos que promueve la interoperabilidad de las soluciones de simulación, permitiendo combinar interfaces de componentes de modelamiento de diferentes software entre sí, adaptando todo esto a determinar las variables del proceso simulado, análisis fisicoquímicos del agua del río Peripa después de la destilación así como la optimización del proceso simulado para dar soluciones ambientales para las aguas de las efluentes de la región ya que al no tener atención por parte del estado ecuatoriano la problemática ambiental será irreversible por el alto nivel de contaminación que existe en la actualidad.

La utilización de programas de simulación de procesos industriales y químicos va en aumento debido a que son herramientas digitales de apoyo en los procesos y optimización de estos, es por esto por lo que fortalecer temas de gran interés como es la disminución de la contaminación del agua con procesos tecnológicos permite tener un mejor panorama de planificación y ejecución.

1.4. Alcance

Los beneficiarios directos de este proyecto será el gobierno autónomo descentralizado de la parroquia de Puerto Limón debido a que esta propuesta tecnológica puede ser utilizada en el mejoramiento de la calidad de los consumidores de agua potable de la parroquia o provincia.

Los beneficiarios indirectos serían los ciudadanos enlazados con el servicio de agua potable. Además, las empresas públicas y privadas que usan procesos similares de potabilización de agua podrán utilizar este proyecto como un enfoque y guía para el mejoramiento del proceso de tratabilidad. También son beneficiarios indirectos, los estudiantes con enfoque de investigación en el análisis de procesos por medio de simulación y el desarrollo de nuevas tecnologías, cuyo propósito fundamental sea optimizar recursos y disminuir el impacto ambiental.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Estado del arte

2.1.1. *Introducción a la simulación de procesos*

La simulación de procesos es una herramienta importante en la ingeniería química y de procesos que abarca un proceso industrial de inicio a fin, desde la investigación y el desarrollo de proyectos el diseño conceptual y la operación de procesos industriales. Este análisis, el diagrama de flujo es una descripción sistémica de los flujos de materia y energía en una planta de proceso por medio de simulación utilizando un software especializado con el objetivo de diseñar la planta o comprender su funcionamiento para así optimizar los procesos industriales que son objetos de estudio. Al hablar de diagramas de flujo en estado estacionario se concluye que son una herramienta utilizada por el ingeniero químico. A continuación, se proporciona una descripción general de la simulación con la ayuda de la herramienta más utilizada en la actualidad como los son los softwares especializados, incluidos los pasos clave en un enfoque de simulación, el esquema del software de diagramas de flujo y la integración de mecanismo de simulación se hace resaltar en la necesidad de examinar el problema antes de lanzarse a la simulación por un software especializado (Kiss, 2014, p.23).

2.1.2. *Importancia y aplicación de los simuladores en la ingeniería química*

Las simulaciones utilizadas para proyectos investigativos, así como propuestas tecnológicas, que parten desde simuladores de procesos industriales para operadores hasta observaciones de la parte interna de unidades de procesos y ensayos de laboratorios simulados para estudiantes y comunidad científica en general, es un centro de utilidad en los ingenieros químicos tanto en el campo académico como industrial, con el que se facilitan ventajas como la capacitación de lo que sucede en los procesos industriales reales per a bajo costo (Kiss, 2014, p.27).

Uno de los aspectos más interesantes y desafiantes es facilitar una simulación que ayude a trabajar con los procesos industriales y químicos reales, mediante la implementación de sistemas complejos: con la codificación manual de la forma de comportarse de cada componente de cada elemento de un proceso industrial, también una codificación directa de un modelo ya establecido así como investigado para que con frecuencia de aplican a sistemas extremadamente exigentes y son difíciles de aplicarlos y volverlos a utilizar para trabajo y proyectos investigativos ya que son muy específicos en sus características.

Una opción muy importante es usar un simulador de diagrama de flujo patrón de la industria apto (como, por ejemplo, Aspen HYSYS, UniSim, Aspen Plus, DWSim, CHEMCAD), programas que los ingenieros químicos utilizamos y que se puede dar un buen uso y conducta rigurosa de estos softwares y optimizar procesos productivos aplicables (Kiss, 2014, p.28).

2.1.3. Tratamiento sostenible de aguas residuales mediante un proceso híbrido de destilación

La recuperación de compuestos contaminantes de las aguas residuales como también aguas de vertientes naturales contaminadas por acción antropogénico es una tarea importante, para aplicar en favor del campo ambiental que ayuda a resolver problemáticas que son objetos de investigación y mejorar la calidad de las aguas de vertientes hídricas naturales que en un mayor porcentaje se encuentran contaminados. En este artículo realizado, se inspeccionó la destilación extractiva de los componentes contaminantes del agua a través de un método de separación eficiente. Según el artículo Sustainable wastewater treatment via PV-distillation hybrid process for the separation el para sustentar el tratamiento sostenible del agua mediante la simulación se utilizó el modelo COSMO-SAC, que es un método termodinámico de equilibrio con el que se calcula coeficientes de actividad de dilución infinita de los componentes, es aplicable la destilación multicomponente (Kiss, 2014, p.31). La destilación se desarrolla en la praxis por medio de cualquiera de los dos procesos. El primer proceso consiste en la obtención de un vapor por ebullición de la mezcla líquida que se va a separar en una sola etapa y el vapor generado se recupera como condensado. En este método no se permite que parte del líquido condensado retorne al vaporizador. Un separador “flash” es ejemplo de este método. El segundo método consiste en retornar parte del condensado al vaporizador de la etapa en cuestión (Kiss, 2014, p.33).

2.2. Bases teóricas

2.2.1. Línea de base en la contaminación del río Peripa

Este río tiene su origen al sureste de Santo Domingo de los Tsáchilas y transita de norte a sur aumentando su caudal con el cauce de varios ríos menores, mientras sirve como limítrofe con la provincia de Manabí, este río desemboca en el río Daule en el que existe una construcción de la represa Daule-Peripa.

Los ríos de las comunas Tsáchilas, en Santo Domingo, ubicado en el occidente del Ecuador, tienen más de una semana soportando más descargas contaminantes, y desde este lunes 28 de septiembre de 2020, los habitantes de la zona de Peripa reportaron otra afectación en sus cauces. Esta vez, la contaminación provocó la muerte de fauna acuática. Según los comuneros, es la segunda ocasión que en las aguas de ese río aparecen sustancias químicas, la gobernadora de la etnia, Diana

Aguavil recordó que en la Fiscalía reposan una docena de peticiones legales para que se señale a los responsables de estos actos contra el ambiente.

En esos documentos se señalan a lubricadoras, lavadoras de autos, talleres mecánicos, fábricas de materiales de limpieza, conjuntos habitacionales, industrias alimenticias, entre otras. El pasado miércoles y jueves otros ríos fueron afectados en circunstancias similares, en ese entonces una sustancia de color negra espesa descendió por el Peripa, Blanquito, Poste y Nile. (Velasco, 2020) Este río también actualmente está contaminado debido a que una de las piscinas de oxidación de la parroquia Puerto Limón vierte el agua de rebose a este causando graves daños al cuerpo hídrico. Mediante diálogos con la autoridad del Ambiental de GAD PROVINCIAL SANTO DOMINGO y la autoridad política de la Parroquia Puerto Limón se llegó a un acuerdo de proporcionar el AVAL por parte del GAD parroquial Puerto Limón, también utilizar análisis fisicoquímicos de las aguas del Río Peripa realizados por la autoridad ambiental del GAD provincial Santo Domingo para así tomar datos de los análisis y empezar con el proyecto tecnológico, en beneficio de la comunidad sin fin de lucro.

2.2.2. Índice de calidad de agua

Con la caracterización fisicoquímica del agua se garantiza un monitoreo de calidad de agua superficial de forma continua (Bianchi et al., 2019). Los umbrales de atención y alarma de estos parámetros solo se refieren a los efectos tóxicos de las sustancias contaminantes estudiadas y no tienen en cuenta la cuestión de la exposición crónica a bajas dosis de productos químicos nocivos, frecuentemente presentes en mezclas complejas. Por otro lado, los ensayos de seguimiento biológico podrían definir eficazmente los riesgos para la salud del ambiente y del hombre (Pellacani et al., 2006: p.2).

Dentro del análisis fisicoquímico están los siguientes parámetros para poder llevar a cabo la simulación.

2.2.2.1. Parámetros fisicoquímicos del agua

Tabla 1-2: Parámetros fisicoquímicos

ITEM	PARÁMETROS	UNIDADES	DEFINICIÓN
1	ACEITES Y GRASAS	mg/l	Es cualquier material recuperado como una sustancia soluble en el solvente y la presencia de aceites y grasas en el agua puede alterar su calidad estética (olor, sabor y apariencia) (2009, p.16)
2	COLORO LIBRE RESIDUAL	mg/l	El cloro (Cl ₂) no se encuentra naturalmente en el agua, sino que se agrega al agua y a las aguas residuales para su desinfección. Si bien el cloro en sí mismo es un gas tóxico, en solución acuosa diluida, no es dañino para la salud humana. En agua potable, un residual de alrededor de 0,2 mg/L es óptimo (Omer, 2020).

3	CONDUCTIVIDAD	uS/cm	La conductividad eléctrica del agua es una medida de la capacidad de una solución para transportar o conducir una corriente eléctrica (Omer, 2020).
4	D.B.O5 DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXÍGENO	mg/l	Si el oxígeno no se reemplaza continuamente por medios naturales o artificiales en el agua, la concentración de oxígeno disuelto se reducirá a medida que los microorganismos descompongan los materiales orgánicos. Esta necesidad de oxígeno se denomina demanda bioquímica de oxígeno (DBO). Cuanta más materia orgánica haya en el agua, mayor será la DBO utilizada por los microorganismos (Omer, 2020).
5	OXÍGENO DISUELTO	%	El oxígeno disuelto se considera uno de los parámetros más importantes de la calidad del agua en arroyos, ríos y lagos. Es una prueba clave de la contaminación del agua. Cuanto mayor sea la concentración de oxígeno disuelto, mejor será la calidad del agua (Omer, 2020).
6	pH	Unidades de pH	El pH es uno de los parámetros más importantes de la calidad del agua. Se define como el logaritmo negativo de la concentración de iones de hidrógeno. Es un número adimensional que indica cuán ácida/básica es el agua. (Omer, 2020).
7	SÓLIDOS DISUELTOS TOTALES	mg/l	La determinación de los sólidos suspendidos totales (SST) se basa en el incremento de peso que experimenta un filtro de fibra de vidrio (previamente tarado) tras la filtración al vacío, de una muestra que posteriormente es secada a peso constante a 103-105 °C. (2013, p.49)
8	SÓLIDOS SUSPENDIDOS TOTALES	mg/l	Indica la cantidad de sólidos (medidos habitualmente en miligramos por litro - mg/l), presentes, en suspensión y que pueden ser separados por medios mecánicos, como por ejemplo la filtración en vacío.
9	TEMPERATURA	°C	La temperatura influye en la viscosidad, la solubilidad, los olores y las reacciones químicas. Por lo tanto, los procesos de sedimentación y cloración y la demanda biológica de oxígeno (DBO) dependen de la temperatura.
10	TPH	mg/l	Los hidrocarburos totales de petróleo (TPH) son un término utilizado para describir una gran familia de varios cientos de compuestos químicos que provienen originalmente del petróleo crudo. El petróleo crudo se utiliza para fabricar productos derivados del petróleo, que pueden contaminar el ambiente. (Omer, 2020).

Fuente: (Mishchuk et al, 2008: p.54).

2.2.2.2. *Parámetros biológicos de la calidad del agua*

Uno de los indicadores más útiles de la calidad del agua puede ser la presencia o ausencia de organismos vivos. Un cuerpo de agua con un gran número de especies bien equilibradas se considera un sistema saludable. Algunos organismos pueden utilizarse como indicación de la existencia de contaminantes en función de su tolerancia conocida a un contaminante específico. Los microorganismos existen en todas partes en la naturaleza (Omer, 2020, p.12).

Un indicador biológico muy importante del agua y la contaminación es el grupo de bacterias llamadas coliformes. Una especie particular de coliformes que se encuentran en las aguas residuales domésticas es *Escherichia coli* o *E. coli*. Incluso si el agua está ligeramente contaminada, es muy probable que se encuentren. Hay aproximadamente 3 millones de bacterias *E. coli* en un volumen de 100 ml de aguas residuales no tratadas. Las bacterias coliformes son organismos agresivos y sobreviven en el agua más tiempo que la mayoría de los patógenos (Omer, 2020, p.12).

2.2.3. *Ósmosis inversa*

La ósmosis inversa (RO) se ha convertido en la tecnología de desalinización dominante para el tratamiento de agua asociado a CSG en Australia, Estados Unidos prefiere el intercambio iónico debido a que el agua contiene principalmente bicarbonato de sodio. Con respecto al ósmosis inversa, ha habido una tendencia creciente hacia el aumento de las tasas de recuperación de agua, con el objetivo final de lograr una descarga de líquido cero debido a las regulaciones más estrictas y los costos de eliminación de residuos (Hirsimaki et al., 2020, p.2).

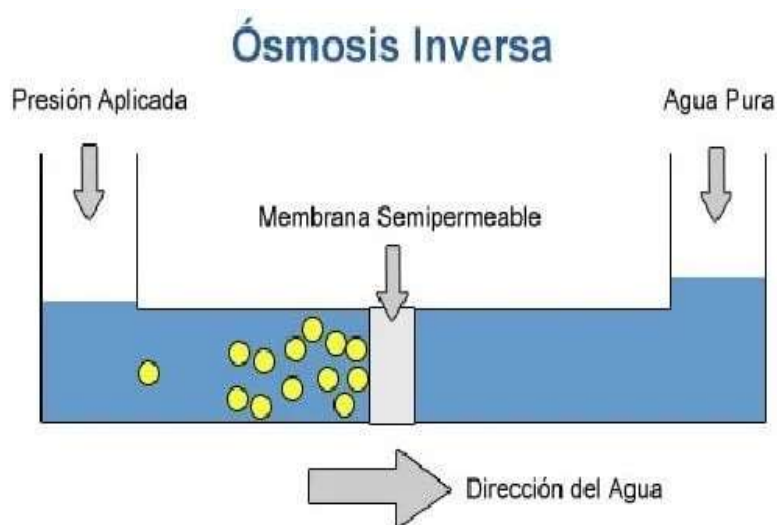


Ilustración 1-2: Mecanismo de la ósmosis inversa

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Como tal, la destilación por membrana se ha evaluado para el tratamiento de agua asociado con CSG debido a la potencial alta recuperación de agua (> 90%). Duong y col llevó a cabo un estudio de planta piloto para el tratamiento de salmuera de RO a partir de agua asociada a CSG mediante destilación de membrana con espacio de aire enrollado en espiral y demostró altas recuperaciones de agua (> 95%) (Hirsimaki et al., 2020: p.2).

Según los autores Zhai, Liu y Van der Meer:

La osmosis inversa es un proceso de separación física en el que el flujo natural de agua es forzado a través de una membrana hacia una solución más concentrada por medio de una presión hidrostática positiva para superar la presión osmótica. El material polimérico de las membranas de ósmosis inversa forma una estructura en capas similar a una red, y las moléculas de agua deben seguir un camino tortuoso a través de la membrana para llegar al lado del permeado. El flujo de fluido depende de la porosidad de la membrana, la fracción del volumen de la membrana y la tortuosidad (es decir, la distancia que debe recorrer una molécula a través de la membrana dividida por el grosor de la membrana). (Zhai, Liu y Van der Mee, 2021: p.18).

Se supone que el flujo de fluido a través de una membrana sigue el modelo de solución-difusión, que depende de complejas interacciones soluto-membrana, incluido el impedimento estérico, interacciones electrostáticas e interacciones hidrofóbicas-hidrofílicas. En comparación con otras membranas, incluidas la nanofiltración (NF), la ultrafiltración (UF) y la microfiltración (MF), las membranas de ósmosis inversa (con un tamaño de poro entre 0,1 y 1,0 nm) pueden rechazar los contaminantes más pequeños y los iones monovalentes. Las membranas de ósmosis inversa suelen funcionar en modo de flujo cruzado y suelen estar disponibles como membranas enrolladas en espiral (SWM), en las que las láminas de membrana se enrollan alrededor de un tubo interior que recoge el permeado. Los estudios han demostrado que la ósmosis inversa puede eliminar material iónico en un grado impresionante.

2.2.3.1. Osmosis inversa en la desalinización

La desalinización de agua de mar mediante el proceso de ósmosis inversa ha representado la mayor parte de la capacidad mundial de desalinización. Como osmosis inversa operaba en base a un mecanismo impulsado por presión, se enfrenta a un obstáculo de consumir demasiada energía (Altaee et al, 2017: p.1). Además, existe una preocupación creciente sobre el efecto del rápido desarrollo de la desalinización del agua de mar en el ambiente, ya que desalinización de agua de mar es un proceso que consume mucha energía y que puede convertir el problema del agua en un problema energético y, posteriormente, en un problema ambiental. La mayoría de los esfuerzos

para mejorar el proceso de desalinización se han dirigido a mejorar la eficiencia energética del proceso (Sihang y Zhenyu, 2019: p.3).

2.2.3.2. Modelo de transporte de membrana

Para una membrana densa, el modelo de transporte más popular es el modelo de "solución/difusión", en el que los penetrantes se disuelven a la interfaz de la membrana y luego se difunde a través de la membrana a lo largo del gradiente de concentración. La separación se produce por las diferencias en solubilidad y difusividad de los permeados. Lonsdale et al. (1965) propuso el modelo de solución/difusión para describir el transporte en membranas "no porosas". El transporte es el resultado de la concentración (actividad) y los gradientes de presión a través de la membrana. La diferencia de potencial químico ($\Delta\mu$) viene dada por:

$$\Delta\mu = RT \ln \Delta a_i + V_i \Delta P$$

Donde a_i es la actividad del soluto o solvente, V_i es el volumen molar (m^3/mol), ΔP es la diferencia de presión a través de la membrana (Pa) y μ es el potencial químico (J/mol)

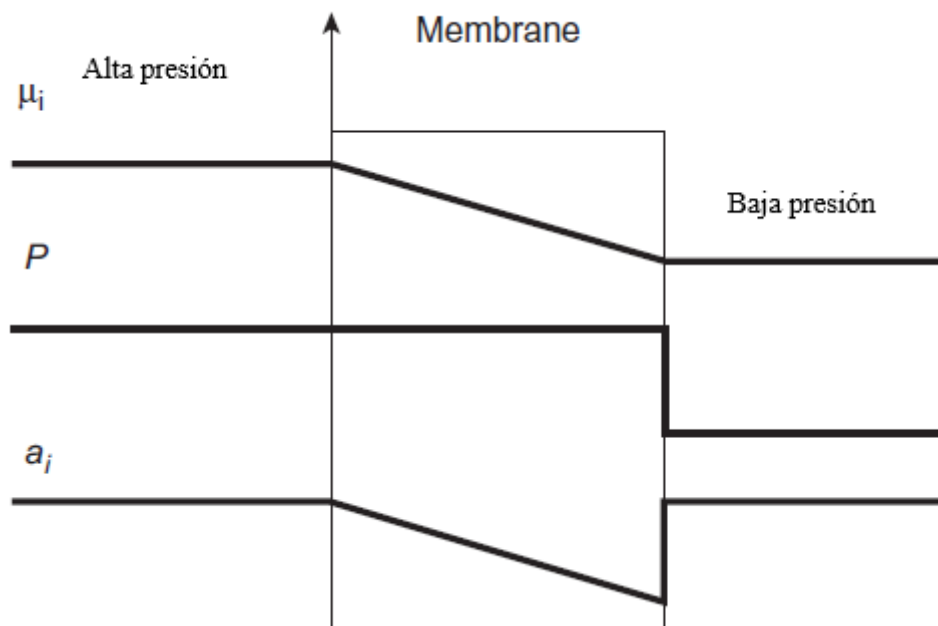


Ilustración 2-2: Comportamiento de solución a través de membrana

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

2.2.4. Membrana

Son instrumentos fabricados de un material específico cuya función es separar en 2 fases una corriente controlando el paso de ciertos componentes de una fase a otra obteniendo un flujo volumétrico más rico en ese componente y el otro libre del mismo.

Según Martínez:

Las membranas han evolucionado de tal manera que hoy día pueden clasificarse por el material del que están conformadas, por su morfología, por su geometría, por su método de separación, etc. Por otro lado, se han llevado a cabo numerosos avances con el objetivo de que puedan soportar sin problemas las condiciones de operación actuales, además de mejorar su rendimiento para conseguir mayor caudal de permeado sin necesidad de presiones tan altas y sin variar el caudal de alimentación. De esta manera, han surgido numerosos tipos de membranas que se adaptan prácticamente a cualquier situación específica, se han añadido un mayor número de etapas y membranas a los procesos e incluso se ha extendido el uso de diferentes tipos de membrana para una misma etapa (método HID, denominado por la empresa DOW ISD, Internally Staged Design). (2019, p.2).

2.2.4.1. Tipos de membrana para desalado

- Membrana con nanocomponentes

De acuerdo con Martínez, 2019:

La idea de usar membranas formadas por nano-componentes surge de la demostración de que se reduce el coste de operación aumentando la permeabilidad de las membranas, aunque eso signifique disminuir el rechazo de sales. El uso de este tipo de membranas puede significar para el proceso tanto un ahorro energético como una mayor producción de permeado. Esta permeabilidad en la membrana se logra aplicando una serie de nanopartículas que forman una delgadísima lámina nanométrica. Esta capa logra una mayor permeabilidad e incluso mejora ligeramente el rechazo conseguido. (2019, p.9).

- Membranas con mayor diámetro

Es el tipo de membrana que se utiliza con mayor frecuencia en la industria siendo la de 8", pero resulta ser un problema para industrias de gran tamaño debido a que conjugan con la economía a escala como lo indica Martínez (2019) "esto se debe a que al ser membranas tan finas (8 pulgadas), para tratar un gran caudal es necesario un gran número de ellas, por tanto, un gran número de módulos, mayor gasto en piping y otros factores que aumentan proporcionalmente con el caudal del proceso" (Martínez, 2019, p.9).

2.2.5. Destilación multietapas

Consiste en múltiples etapas orientadas una sobre la otra, donde el agua superior cae hasta llegar a la última etapa, la cual será calentada por la bandeja para seguir el proceso de evaporación y condensación (Franco, et al., 1999: pp.32-33). Usualmente se aplica para proyectos de escala mayor, dado que el costo del mantenimiento es elevado ya que su consumo energético oscila es de 3,4 kWh/m³ a 4 kWh/m³, lo que causa que su costo de producción sea de aproximadamente 1,5 \$/m³ (Dévora et al., 2012: pp.1-2).

Fajardo en su trabajo de investigación indica que la destilación multietapas consiste:

En el principio de la destilación flash. El agua marina es precalentada en un tanque hasta una temperatura un poco menor a la temperatura de saturación, y posteriormente se lleva a un recipiente en donde se disminuye la presión, generando un decrecimiento en el punto de ebullición del agua para lograr que el agua se evapore, y que posteriormente se condense, obteniendo así agua pura. El calor liberado en el proceso de condensación, al igual que la destilación multiefectos, es aprovechado, y se utiliza para el calentamiento de la salmuera en otra etapa. (2018, p.58).

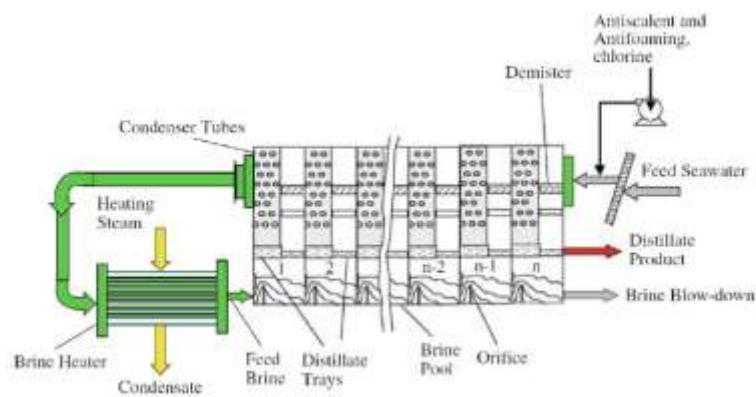


Ilustración 3-2: Destilado multietapas en desalinización de agua

Fuente: (Fajardo, 2018, p.59).

Según lo indica Fajardo:

El agua de mar caliente circula secuencialmente a través de varias etapas flash, y a medida que avanza, en cada etapa la presión es menor, lo que provoca que el agua se vaporice rápidamente. A esta parte del proceso se le denomina “efecto parpadeo” debido a que el agua se convierte en vapor casi instantáneamente. La vaporización continua hasta que la salmuera se enfría, y el vapor generado se condensa en los tubos intercambiadores de calor de cada etapa. En la imagen se observa que el agua de alimentación ingresa disminuye la temperatura de los tubos para producir la condensación mientras se precalienta gracias a la transferencia del calor proveniente del vapor, es decir, el proceso tiene una

eficiencia térmica notable, por lo que disminuye el consumo energético requerido para incrementar la temperatura del agua de mar de entrada en cada etapa. (2018, p.59).

El producto de cada etapa se recolecta y luego es bombeado hasta un tanque de almacenamiento, mientras que la salmuera se recoge y añade a la etapa siguiente, o si se requiere, se saca del sistema. La cantidad de agua dulce producida se verá influenciada por la temperatura del agua salada y el número de etapas del proceso. El agua obtenida es de grado industrial, por lo que bajo los estudios realizados en México y por Alkaisi, generalmente, si se pretende usar el agua para el consumo humano, debe someterse a un proceso de remineralización.

Para calentar el agua de mar inicialmente se utiliza vapor a baja presión procedente, comúnmente de una planta de cogeneración. El evaporador generalmente se compone de múltiples etapas (entre 19 y 28) y opera a temperaturas entre los 90°C y los 120°C. Si el proceso se realiza a temperaturas mayores a 120°C se aumenta el rendimiento energético, pero también crece el potencial de formación de incrustaciones en los materiales metálicos que tienen contacto con el agua de mar. Entre las etapas se instalan orificios y deflectores que producen la reducción de la presión que lleva la salmuera hasta la presión de vapor necesaria para causar la ebullición del agua. Adicionalmente, cada etapa se provee de desempañado para reducir al máximo el arrastre de gotas de salmuera hacia el producto.

En el sistema también se instala un descarbonizador (cuando se usa ácido para inhibir la aparición de incrustaciones) y un desaireador de vacío que se encarga de eliminar los gases no condensables como el N₂, O₂ y CO₂ (Fajardo, 2018, p.59).

Las ventajas de este sistema de destilación por etapas es que las condiciones tanto físico químicas del agua con respecto a calidad no es tan importante como en el caso de la desalinización por membrana, otro de los factores a considerar es que es de fácil construcción y manejo.

Las limitaciones que presenta esta tecnología de desalinización es que no puede operar a menos del 60% de su capacidad total y no se recomienda acoplarlo con energías renovables

2.2.6. Simulación de procesos

Los estudios basados en modelos tienen una amplia gama de usos importantes y pueden ayudar a los profesionales a ahorrar tiempo y dinero, al tiempo que mejoran la calidad y la seguridad de un proceso. Los estudios basados en modelos especialmente dinámicos tienen muchas aplicaciones diferentes debido a su capacidad de investigar no solo las condiciones de estado estacionario sino también los patrones transitorios. Por lo tanto, la realización de dichos estudios, por ejemplo, la

optimización de un solo disparo, juega un papel importante en la mejora de los procesos de producción con el fin de satisfacer las demandas relacionadas, por ejemplo, con los aspectos ambientales al tiempo que se aumenta la capacidad de producción (Yamane et al., 2019).

2.2.7. DWSIM - Chemical Process Simulator

Como punto de partida para el desarrollo del trabajo se utilizará el software libre DWSIM, el cual es un simulador de procesos químicos, cuenta con interfaz gráfica de usuario; y permite a los estudiantes de ingeniería química comprender el comportamiento de sistemas químicos mediante el uso de rigurosos modelos de operaciones unitarias y termodinámicos (DWSIM, 2020).

2.2.7.1. Características DWSIM

DWSIM es capaz de simular procesos de equilibrio vapor-líquido-líquido-sólido en estado estacionario con los siguientes modelos termodinámicos y operaciones de unidades:

Tabla 2-2: Características de DWSIM

Modelos termodinámicos	<i>Peng – Robinson</i> <i>Peng – Robinson – Stryjek – Vera 2</i> <i>Soave – Redlich – Kwong</i> <i>Lee – Kesler</i> <i>Lee – Kesler – Plöcker</i> <i>UNIFAC (-LL)</i> <i>UNIFAC modificado (Dortmund)</i> <i>UNIQUAC</i> <i>NRTL</i> <i>COSMO – SAC</i> <i>Chao – Seader</i> <i>Grayson – Streed</i> <i>LIQUAC</i> <i>Extended UNIQUAC</i> <i>Raoult's Law</i> <i>IAPWS – 97 Steam Tables</i> <i>IAPWS – 08 Seawater</i> <i>Black – Oil</i> <i>Sour Water</i>
-------------------------------	---

Operaciones de la unidad	Zócalo CAPE-OPEN, mezclador, divisor, separador, bomba, compresor, expansor, calentador, enfriador, válvula, segmento de tubería, columna de acceso directo, intercambiador de calor, reactores (conversión, PFR, CSTR, equilibrio y Gibbs), columna de destilación, Absorbentes simples, refluídos y rebobinados, separador de componentes, placa de orificio, separador de sólidos, filtro de torta continuo; Operaciones de la Unidad Excel, Script y Flowsheet.
Utilidades	Envolvente de fase, hidratos de gas natural, propiedades de componentes puros, punto crítico verdadero, dimensionamiento de PSV, dimensionamiento de vasos, hoja de cálculo y propiedades de flujo frío de petróleo.
Herramientas	Creador compuesto, Bulk C7 + / Curvas de destilación Caracterización de petróleo, Gerente de análisis de petróleo, Gerente de reacciones.
Análisis y optimización de procesos	Utilidad de análisis de sensibilidad, optimizador multivariante con restricciones limitadas.
Extras	Regresión de datos binarios VLE / LLE / SLE, soporte para scripts de tiempo de ejecución, complementos y objetos de monitoreo de hoja de flujo CAPE-OPEN.

Fuente: DWSIM, 2020).

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

2.2.7.2. Interfaz plataforma DWSIM

Al ejecutar DWSIM en Windows se tiene la opción de dos interfaces gráficas de usuario (GUI): Classic y multiplataforma, esta última también conocida como IU "Nueva". La interfaz de usuario clásica es la basada en Windows Forms, con todas las funciones (DWSIM, 2020).

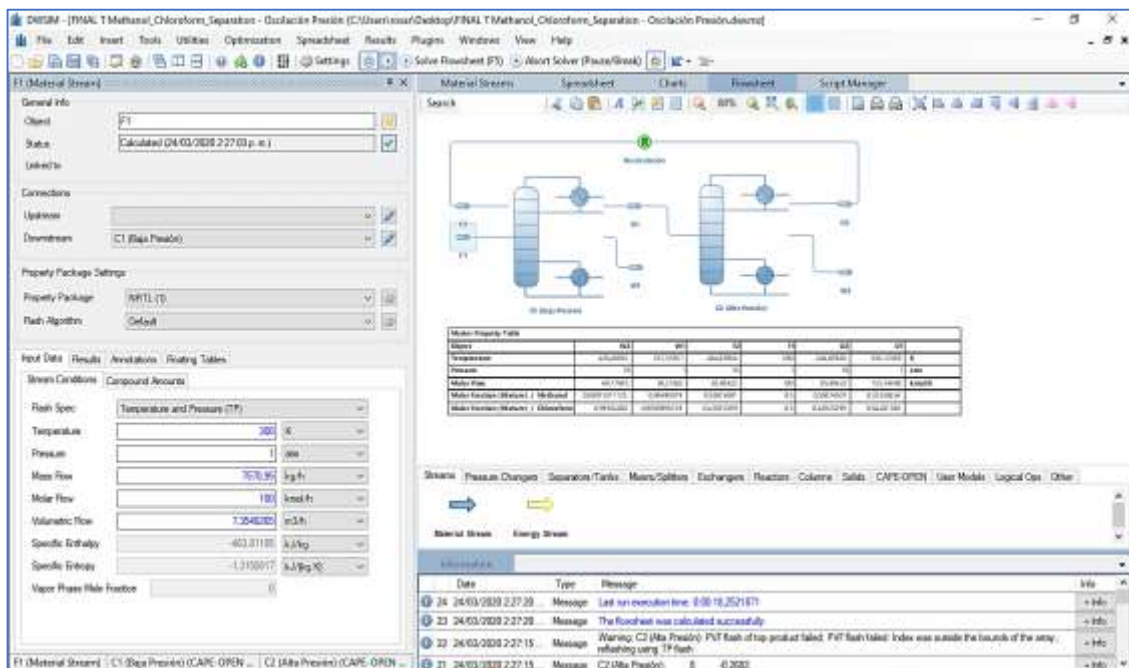


Ilustración 4-2: Interfaz DWSIM

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

2.2.7.3. Modelos de operación de la unidad de simulación de procesos

El modelado y la simulación de procesos químicos pueden usarse como una herramienta de diseño en el desarrollo de plantas químicas, y se utilizan como un medio para evaluar diferentes opciones de diseño. Los estándares de interfaz CAPE-OPEN se desarrollaron para permitir la implementación y utilización de componentes de modelado de procesos en cualquier entorno de modelado de procesos compatible (Leino, 2016).

Los estándares CAPE-OPEN son estándares uniformes para la interfaz de componentes de software de modelado de procesos desarrollados específicamente para el diseño y operación de procesos químicos. Los estándares CAPE-OPEN son abiertos, multiplataforma, uniformes y están disponibles de forma gratuita. Se describen en un conjunto de documentación formal (DWSIM, 2019).

DWSIM admite una serie de características CAPE-OPEN, que incluyen:

a) Paquetes de propiedades (*Thermo Specs 1.0 y 1.1*)

Puede utilizar el equilibrio termodinámico externo CAPE-OPEN y las calculadoras de propiedades como paquetes de propiedades en DWSIM. Solo tendrá que asignar los componentes y las fases del paquete de propiedades externas a los de las bases de datos internas de DWSIM (DWSIM, 2019).



Ilustración 5-2: Paquetes de propiedades

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

b) Operaciones de la unidad

Las operaciones de la unidad CAPE-OPEN se pueden agregar a los diagramas de flujo DWSIM y conectarse a/desde las corrientes de energía y material al igual que las operaciones normales de la unidad DWSIM. DWSIM también implementa las interfaces de reacción CAPE-OPEN para que pueda usar su modelo de reactor CAPE-OPEN junto con DWSIM y gestionar sus reacciones utilizando el Administrador de reacciones como de costumbre (DWSIM, 2019).

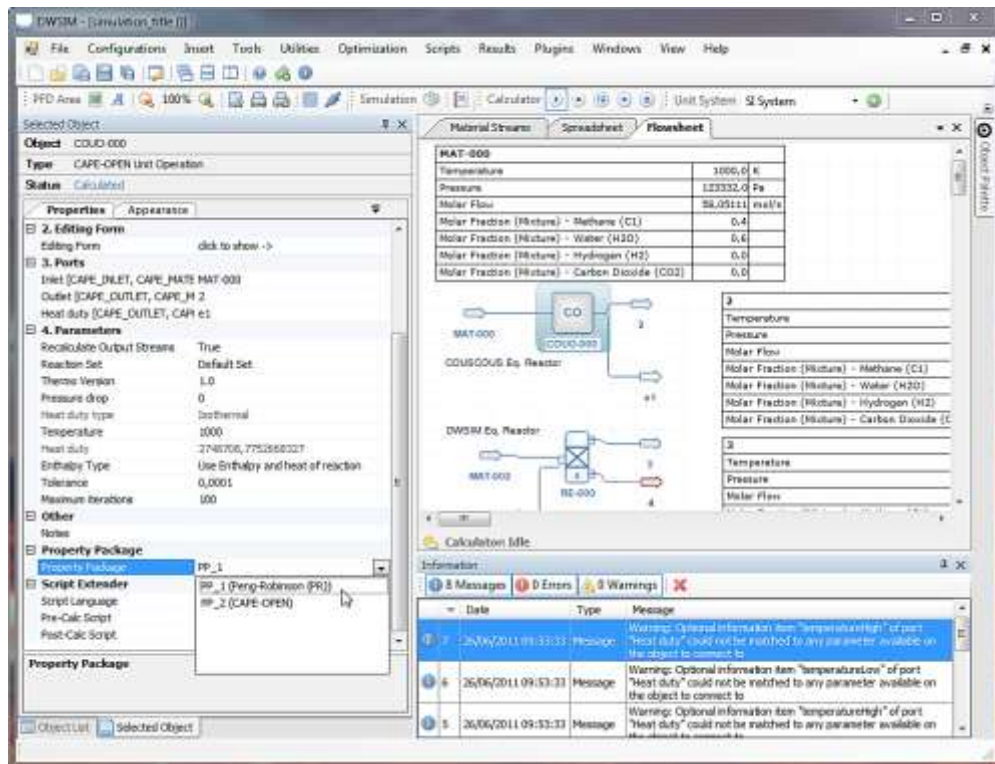


Ilustración 6-2: Operaciones de la unidad

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

2.3. Marco Legal

2.3.1. Constitución del Ecuador

La Ley de Gestión Ambiental establece que la Autoridad Ambiental Nacional la ejerce el Ministerio del Ambiente, instancia rectora, coordinadora y reguladora del sistema nacional descentralizado de Gestión Ambiental; sin perjuicio de las atribuciones que en el ámbito de sus competencias y acorde a las Leyes que las regulan, ejerzan otras instituciones del Estado (Asamblea Nacional del Ecuador, 2008)

2.3.1.1. Normativas aplicables

Tabla 3-2: Leyes y Normativas

LEY O NORMATIVA	CAPÍTULOS O ARTÍCULOS	ARTÍCULO
Constitución de la república del Ecuador	Cap. II, Art.14	Se reconoce el derecho de la población a vivir en un ambiente sano, se declara de interés público la preservación del ambiente, prevención del daño ambiental y la recuperación de los espacios naturales degradados.
	Cap. II, Art. 32	La salud es un derecho que garantiza el Estado, cuya realización de vincula al ejercicio de otros derechos, entre ellos el derecho al agua, la alimentación, la educación, la cultura física, el trabajo, la seguridad social, los ambientes sanos y otros que sustentan el buen vivir.
	Cap. VII, Art. 71, 72	La naturaleza tiene derecho a que se respete integralmente su existencia. Toda persona, comunidad, pueblo o nacionalidad podrá exigir a la autoridad pública el cumplimiento de los derechos de la naturaleza. De igual manera, la naturaleza tiene derecho a la restauración.
	Cap. VII, Art.73	El estado aplicará medidas de precaución y restricción para las actividades que puedan conducir a la extinción de especies, la destrucción de ecosistema o la alteración permanente de los ciclos naturales.
	Cap. VII, Art.74	Las personas, comunidades, pueblos y nacionalidades tendrán derecho a beneficiarse del ambiente y de las riquezas naturales que les permitan el buen vivir.
	Cap. IX, Art. 83, Numeral 6	Respetar los derechos de la naturaleza, preservar un ambiente sano y utilizar los recursos naturales de modo racional, sustentable y sostenible.
	Título VII, Cap. II, Art. 395	El Estado garantizará un modelo sustentable de desarrollo, las políticas ambientales serán de obligatorio cumplimiento por parte del Estado, garantizando la participación activa de personas, comunidades y pueblos afectados en la planificación, ejecución y control de toda actividad que genere impactos ambientales.
Ley de Prevención y Control de la Contaminación Ambiental	Art.1	Queda prohibido expeler hacia la atmósfera o descargar en ella, sin sujetarse a las normas correspondientes, técnicas y regulaciones, que a juicio puedan afectar el ambiente en sus respectivas áreas de competencia, salud humana, flora, fauna y ecosistemas.
TULSMA, Reforma del Libro VI	Art.210	Se prohíbe la descarga y vertido que sobrepase los límites permisibles o criterios de calidad correspondiente. Se prohíbe la descarga y vertidos de aguas servidas o industriales, en quebradas secas o nacimientos de cuerpos hídricos u ojos de agua.
	Art.223	Los Sujetos de Control cuyas actividades generen olores, deberán tomar todas las medidas técnicas ambientales para disminuir dichos olores. Adicionalmente de ser necesario, la Autoridad Ambiental establecerá Normas Técnicas específicas con respecto a olores, mediante la figura legal correspondiente.
	Catálogos de proyectos, obras o actividades	Listado y clasificación de los proyectos, obras o actividades existentes en el país en función de las características particulares de éstos y de la magnitud de los impactos negativos que causan al ambiente.

Fuente: MAE-GAD Santo Domingo, 2015.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Etapas de la metodología

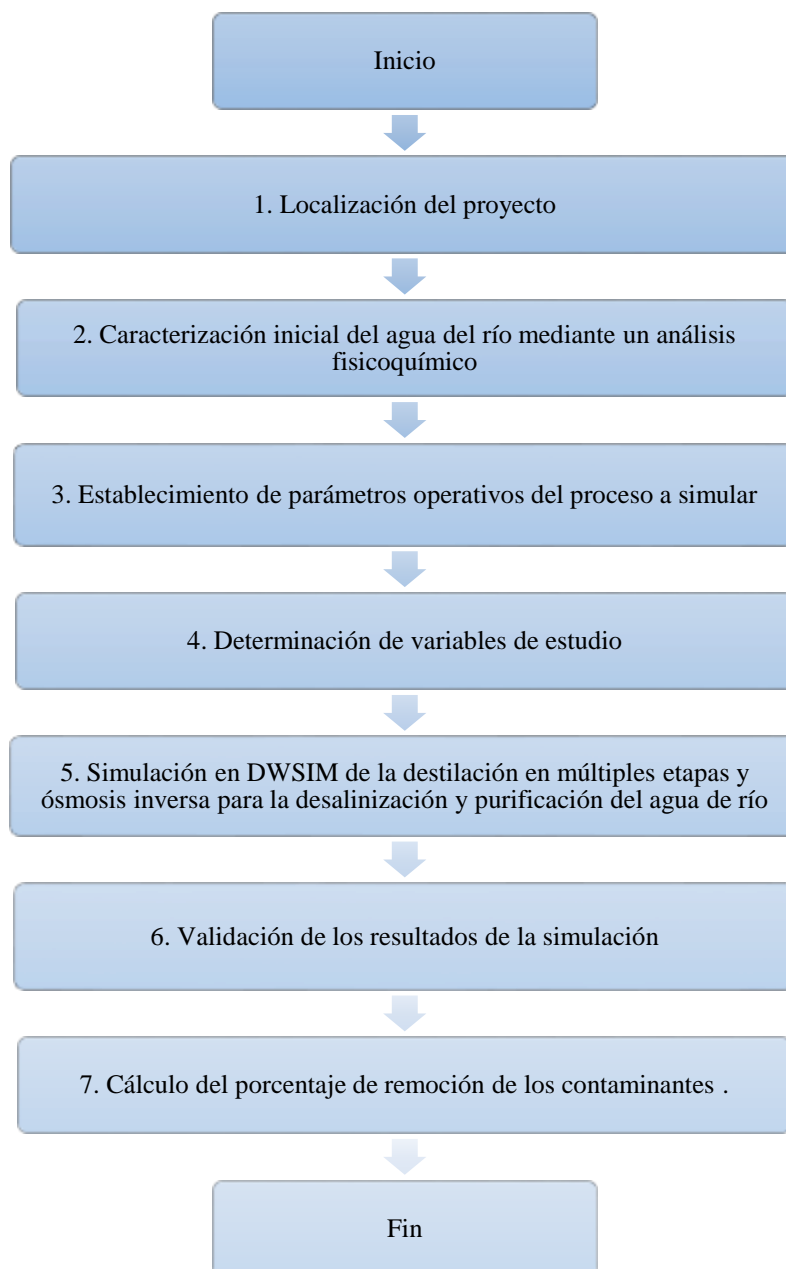


Ilustración 1-3: Metodología

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.2. Tipo de estudio

El presente proyecto denominado “Simulación del proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa para la desalinización y purificación del agua del río Peripa provincia Santo Domingo” es de tipo propuesta tecnológica, la propuesta tecnológica busca simular un proceso experimental, para ello, el análisis se realiza en condiciones de un estado estacionario, empleando la caracterización físico-química inicial del agua del río Peripa con base a normativas, técnicas y guías que permitan la identificación de los parámetros contaminantes en la contaminación de cuerpos de agua dulce. De esta manera realizar una intervención en dichas variables mediante la simulación de un proceso de tratabilidad que se propone el siguiente estudio.

3.2.1. Estudio Descriptivo

Un estudio descriptivo es aquél en que la información es recolectada sin cambiar el entorno (es decir, no hay manipulación), investigación descriptiva porque describe situaciones, eventos o hechos, se realiza un análisis un análisis de la situación actual del río Peripa, se hace cuantificaciones y se establece modelaciones. Se describe situaciones hacia lo que es la recuperación del agua del río mediante el proceso de purificación, se hace análisis de la situación actual mediante la caracterización estableciéndose variables para la simulación y finalmente se obtiene lo resultados realizándose una descripción (Veiga de Cabo et al., 2008: p.23).

3.3. Métodos y Técnicas de recolección de datos

3.3.1. Métodos

En el presente estudio, se implementarán tres métodos que faciliten el desarrollo del proyecto y permitan dar soluciones viables. Estos métodos son: inductivo, deductivo, experimental, y simulación.

- ***Método sistémico***

Es un método sistémico porque está dirigido a modelar el objeto mediante la determinación de componentes y a simular con la aplicación del software, es decir los parámetros de la caracterización del agua el tratamiento de los mismo mediante la simulación del destilador en múltiples etapas y la osmosis inversa, se convierte en una herramienta fundamental para la toma de decisiones y la implementación de la factibilidad del proyecto.

Este método nos permite plantear posibles soluciones una vez que la problemática ha sido identificada en nuestro sistema de estudio. Es decir, en el río Peripa, la tratabilidad del efluente mediante la simulación del proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa es una alternativa para que los parámetros que han sido identificados puedan cumplir con la normativa.

- **Método de simulación**

Este método permite modelar y simular la tratabilidad del efluente. Con el adecuado modelado del proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa en el software DWSIM se puede lograr la simulación de la desalinización y purificación del agua del río Peripa. La validación de la simulación se realizará calculando porcentaje de remoción de los contaminantes y comparando la cantidad de contaminantes obtenidos por la simulación del proceso de tratabilidad con el límite permisible establecido en la norma.

3.3.2. Técnicas de recolección de datos

- **Fuentes bibliográficas**

La recopilación de la información empleada en el presente trabajo es proveniente de:

- Artículos publicados en revistas científicas electrónicas indexadas y no indexadas.
- Libros digitales afines al tema.
- Tesis de posgrados publicadas a nivel nacional e internacional.
- Página web oficial de DWSIM.

3.4. Localización del proyecto

La propuesta tecnológica se desarrolla en la parroquia de Puerto Limón, cantón Santo Domingo de la provincia de Santo Domingo de los Tsáchilas cuyas características geográficas se describen a continuación:

Tabla 1-3: Características geográficas de la parroquia Puerto Limón

UBICACIÓN	La Parroquia Puerto Limón se encuentra ubicada, en el extremo suroccidental, a 29 km de Santo Domingo, entrando por el km 6 1/2 de la vía a Quevedo, margen derecho.
LATITUD	0° 23' 14,8" sur
LONGITUD	79° 22' 22,6" oeste
ALTITUD	244 msnm
CLIMA	Varía entre 23 a 16 °C

Fuente: (GAD Municipal Santo Domingo, 2017).



Ilustración 2-3: Ubicación geográfica de la parroquia Puerto Limón

Fuente: (Obtenido en Google Maps, 2022).

3.5. Caracterización inicial del agua del río mediante un análisis fisicoquímico

La toma y recolección de la muestra se efectuará in-situ en el puente del Río Peripa con base en la normativa NTE INEN 2176:2013 y NTE INEN 2169:2013 según lo establecido en el acuerdo ministerial 097-A TULSMA: ANEXO I, LIBRO VI. Este muestreo se realizará una vez de acuerdo con la tabla 2-3, para luego ser enviado a un laboratorio certificado y obtener el análisis fisicoquímico.

Es importante señalar que los datos de este análisis fueron facilitados por el departamento encargado del cuidado y control del río Peripa.



Ilustración 3-3: Análisis fisicoquímico de agua, TPH fuera del límite permisible
Fuente: (GAD Provincial Santo Domingo, 2021).



Ilustración 4-3: Análisis fisicoquímico de agua, cloro fuera del límite permisible
Fuente: (GAD Provincial Santo Domingo, 2021).

3.6. Establecimiento de los parámetros de operación del proceso a simular

Para el desarrollo de la propuesta tecnológica se han utilizado los parámetros de simulación descritos en el artículo científico que lleva por nombre “Sustainable wastewater treatment via PV-distillation hybrid process for the separation of ethyl acetate” propuesto por Peizhe, Cui et al., (2021), de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad de Ciencia y Tecnología de Qingdao, China. El artículo mencionado se tomará como base para identificar los parámetros y variables óptimas en el proceso a simular.

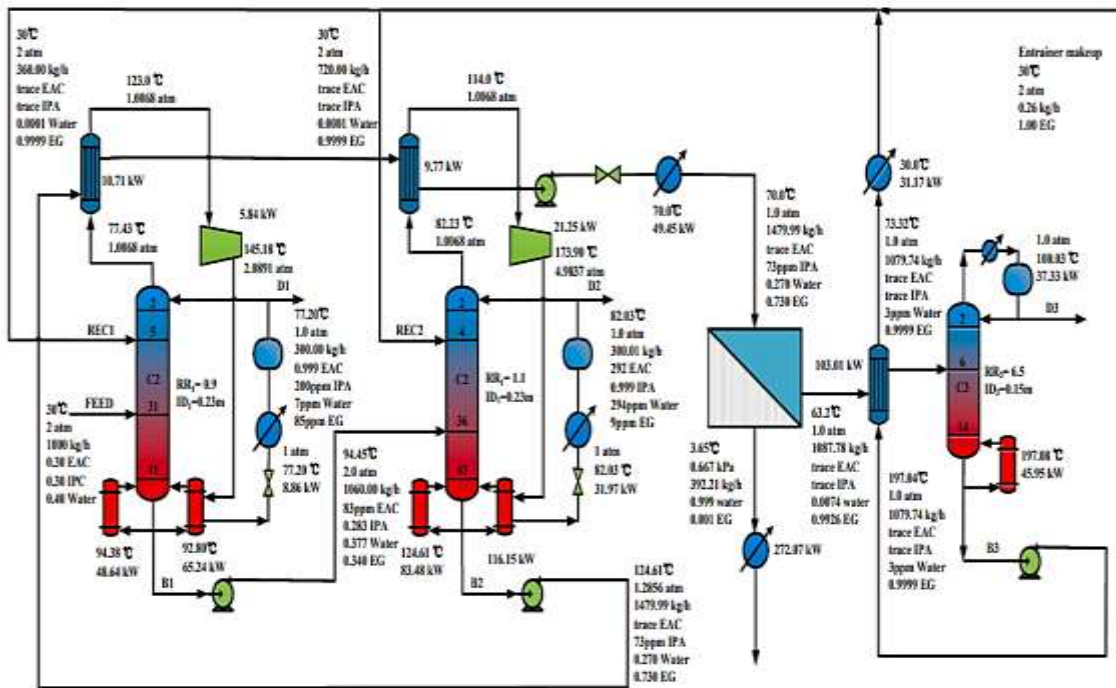


Ilustración 5-3: Diagrama de flujo del proceso de destilación en múltiples etapas y una membrana de purificación

Fuente: (Peizhe, 2021, p.6).

3.6.1. Generalidades del proceso

Tabla 2-3: Parámetros de operación iniciales

Parámetros	Cantidad	Unidades
Presión	2	atm
Temperatura	30	°C
Relación de alimentación EAC/IPA	1:1	Adimensional

Fuente: Peizhe, 2021, p. 6.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Tabla 3-3: Condiciones operativas de la primera columna

Parámetros	Cantidad	Unidades
Presión	1,1	atm
Platos totales	41	Adimensional
Plato de alimentación	31	Adimensional
Plato de recirculación	5	Adimensional
Relación de reflujo	0,9	Adimensional
Temperatura en el condensador	123	°C
Temperatura en el calderín	94,45	°C
Calor en el condensador	10,71	kW
Calor en el calderín	65,24	kW

Fuente: Peizhe, 2021, p. 6.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Tabla 4-3: Condiciones operativas de la segunda columna

Parámetros	Cantidad	Unidades
Presión	2	atm
Platos totales	43	Adimensional
Plato de alimentación	36	Adimensional
Plato de recirculación	4	Adimensional
Relación de reflujo	1,1	Adimensional
Temperatura en el condensador	114	°C
Temperatura en el calderín	124,61	°C
Calor en el condensador	9,77	kW
Calor en el calderín	31,97	kW

Fuente: Peizhe, 2021, p. 6.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Tabla 5-3: Condiciones operativas de la tercera columna

Parámetros	Cantidad	Unidades
Presión	1	atm
Platos totales	14	Adimensional
Plato de alimentación	6	Adimensional
Relación de reflujo	6,5	Adimensional
Temperatura en el condensador	100,03	°C
Temperatura en el calderín	197,08	°C
Calor en el condensador	37,33	kW
Calor en el calderín	45,95	kW

Fuente: Peizhe, 2021, p. 6.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.7. Determinación de las variables de estudio

3.7.1. Variables Independientes

- Presión del sistema 1 atm
- Temperatura el proceso isotérmico a 25 °C

3.7.2. Variables Dependientes:

- Concentración molar de cloro libre residual en el agua tratada.
- Concentración molar de n-hexano en el agua tratada.

3.8. Simulación en DWSIM del proceso

3.8.1. Especificaciones iniciales

Para la simulación de las columnas de destilación se usó el equipo que proporciona DWSIM denominado “Distillation Column”. El paquete termodinámico que rige la simulación es Peng-Robinson (PR) y el método de solución Wang-Henke (Bubble Point), uno de los métodos de punto de burbujeo bien conocidos y ampliamente utilizados para simular problemas de destilación de múltiples etapas vapor-líquido.

Tabla 6-3: Parámetros de operación iniciales

Parámetros	Cantidad	Unidades
Presión	1	atm
Temperatura	25	°C
Relación de alimentación Cl ₂ /N-HEX(TPH)	1:1	adimensional

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

El paquete termodinámico seleccionado es Peng-Robinson es porque DWSIM es un software donde se maneja con Peng- Robinson y presenta la mayor información para este modelo termodinámico, a que es una ecuación de tipo cúbica primaria que se expresa en términos de las propiedades críticas es decir cerca del punto crítico de las sustancias, la aplicabilidad de esta ecuación se da en procesos que requieren del cálculo de los equilibrios líquido vapor, las densidades líquidas y el factor de compresibilidad, pero solo pueden tener interacciones binarias de la presión, la temperatura y la composición (Cadavid, 2013, p.3).

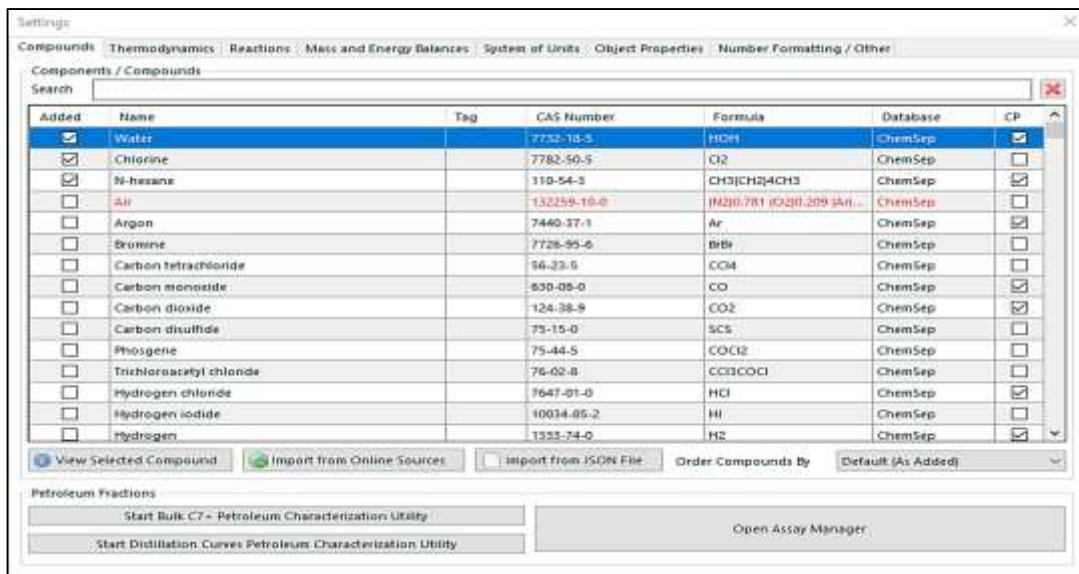


Ilustración 6-3: Selección de compuestos que intervienen en la simulación

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

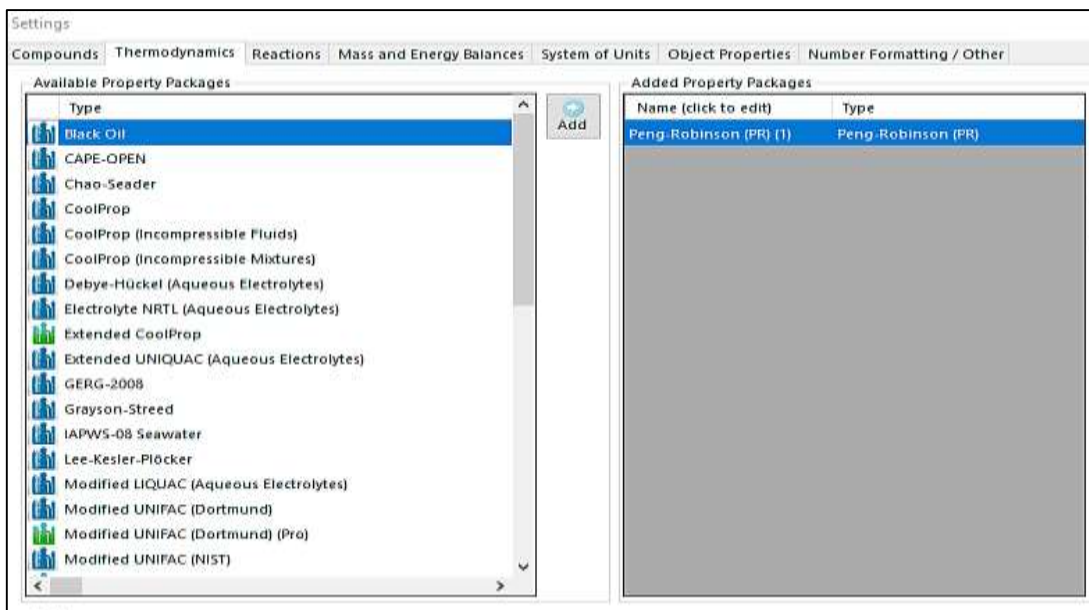


Ilustración 7-3: Selección del paquete termodinámico

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

La selección del sistema de unidades de acuerdo con las propiedades, los componentes que ingresan al sistema simulado como las unidades del cloro y TPH (Hexano) están en mg/L dentro de la Norma que es 0,5 mg/L el valor de referencia permitido, al ingresar las unidades se hace una conversión a mol/L.

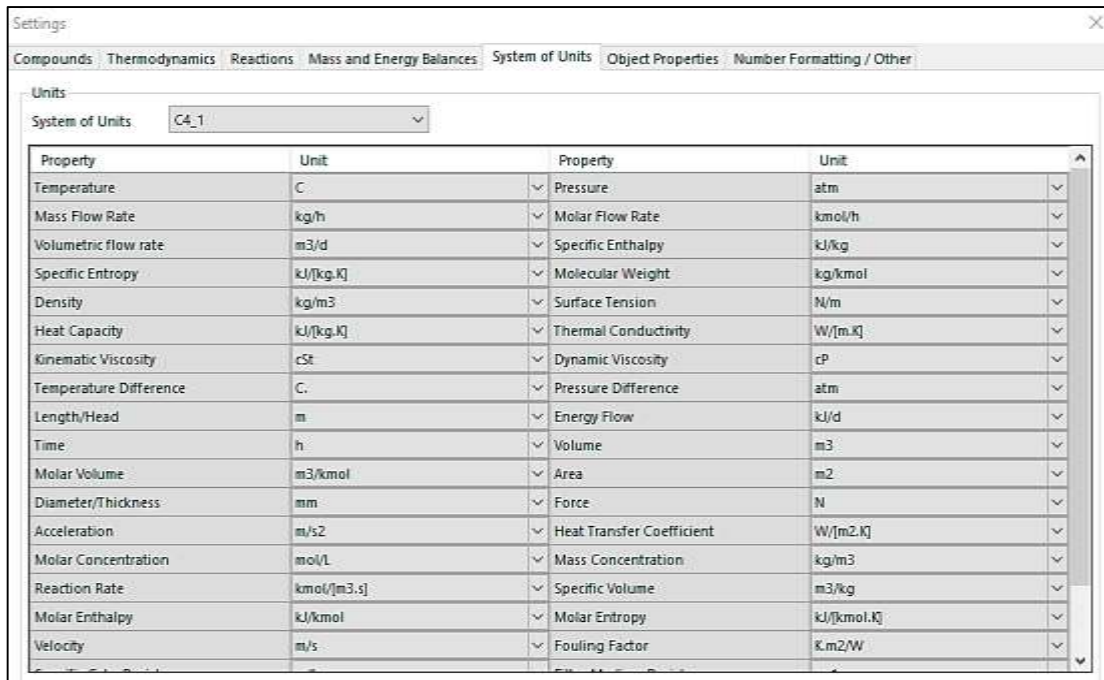


Ilustración 8-3: Selección del sistema de unidades

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.8.2. Especificaciones en la primera columna de destilación

En especificaciones en la primera columna fig. 7-3 se utiliza 12 de platos ya que las corrientes de entrada pasan por cada plato en sentido descendiente y las corrientes de vapor ascienden, un número mayor de platos en la columna.

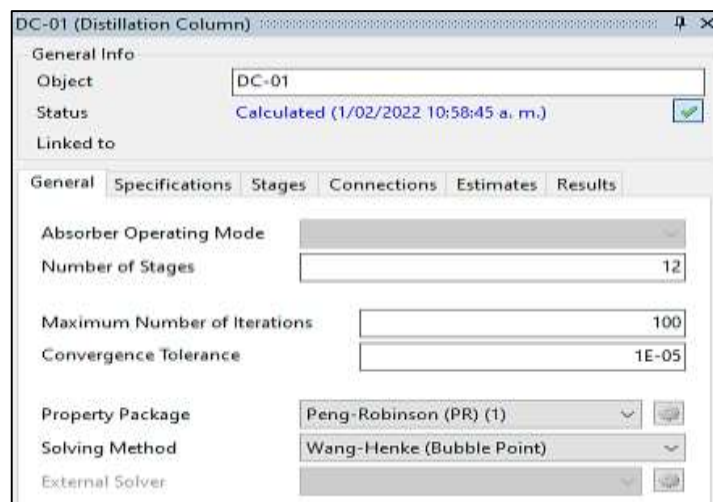


Ilustración 9-3: Generalidades en la primera columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

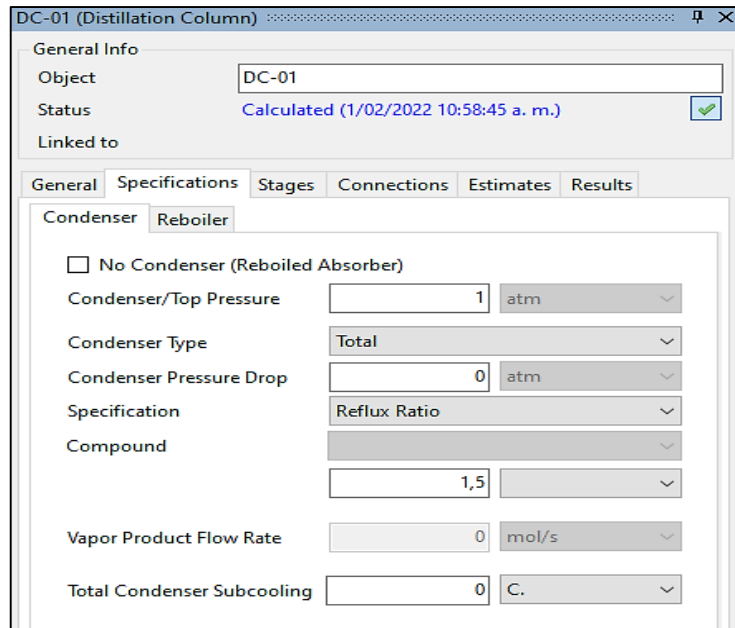


Ilustración 10-3: Especificaciones en la primera columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.8.3. Especificaciones en la segunda columna de destilación

En la Figura. 9-3 y Fig. 10-3 las especificaciones de la segunda columna de destilación existen 12 platos también y son los mismos parámetros a utilizar debido a que los componentes que ingresan se han separado en un mínimo porcentaje, además se tiene la misma presión del condensador y antes de ingresar los componentes a la segunda columna pasa por un intercambiador de calor el destilado, en esta columna el agua ingresa con una temperatura elevada y se aprovecha el calor de los residuos que salen de la primera columna con una temperatura alta.

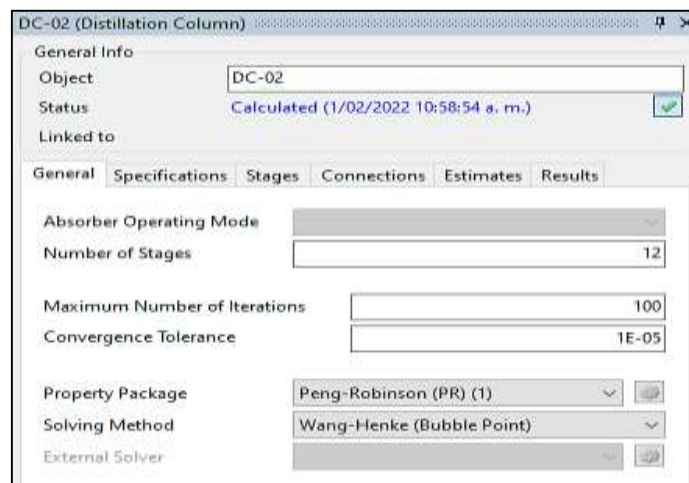


Ilustración 11-3: Generalidades en la segunda columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

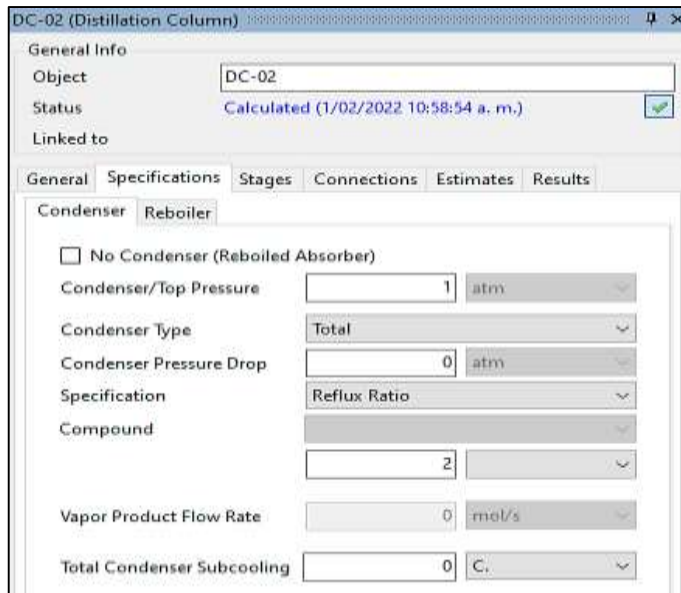


Ilustración 12-3: Especificaciones en la segunda columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.8.4. Especificaciones en la tercera columna de destilación

La tercera columna tiene los 10 platos que ingresa después de pasar por un separador que sale el agua tratada, y se utiliza esta columna para que el residuo del separador membrana que contiene cloro y hexano se separen y se recupera el hexano que se almacenan, saliendo del destilado todo el cloro que se obtiene dentro del proceso.

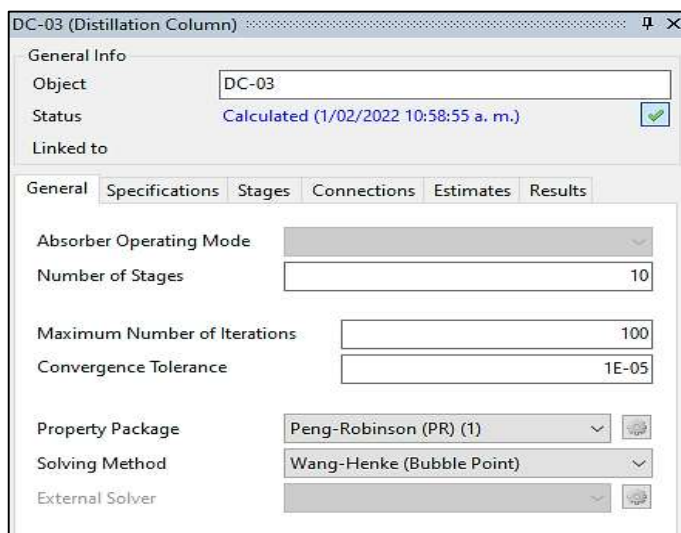


Ilustración 13-3: Generalidades en la tercera columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

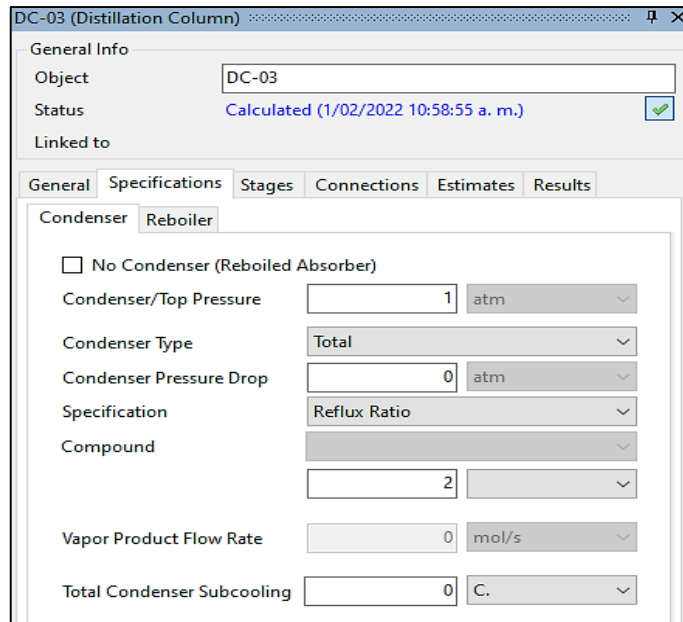


Ilustración 14-3: Especificaciones en la tercera columna

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Como se puede observar en la fig. 12-3 la simulación del proceso de tratabilidad completo que corresponde de tres columnas de destilación, de la segunda columna se obtiene una mezcla de cloro y agua pasando por un proceso osmótico, obteniéndose del destilado el agua tratada y el residuo de la mezcla pasa a la tercera columna obteniéndose una recuperación de hexano y de cloro residual.

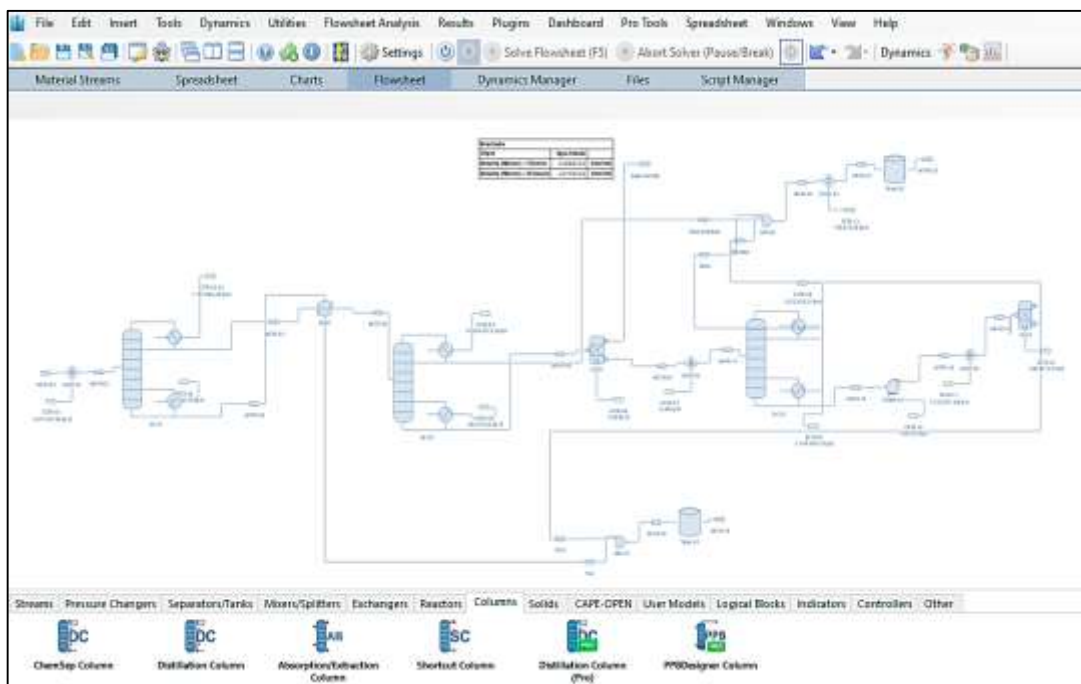


Ilustración 15-3: Simulación del proceso de tratabilidad

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.9. Validación de los resultados de la simulación

Una vez desarrollada la simulación del proceso de tratabilidad es necesario validar los resultados obtenidos en DWSIM comparándolos con aquellos reportados por la normativa ecuatoriana aplicable, para este caso, los resultados de la simulación respecto al cloro libre residual se comparan con los valores de referencia tomado de Acuerdo Ministerial N097, Libro VI de la Calidad Ambiental Tabla 9: Límites de descarga a un cuerpo de agua dulce.

Tabla 7-3: Valores de referencia para el cloro libre residual en cuerpos de agua dulce

Parámetro	Expresado como	Unidad	Límite máximo permisible	Valor después de la simulación
Cloro activo	Cl	mg/L	0,5	0,260
⁽¹⁾ Valores de referencia tomada de Acuerdo Ministerial N097, Libro VI de la Calidad Ambiental. Tabla 9: Límites de descarga a un cuerpo de agua dulce				

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Para los resultados de la simulación respecto al n-hexano se compara con los valores de referencia de TPH tomado de Acuerdo Ministerial N° 097, Libro VI de la Calidad Ambiental. Tabla 2: Criterios de calidad admisibles para la preservación de la vida acuática y silvestre en aguas dulce.

Tabla 8-3: Valores de referencia para los TPH en cuerpos de agua dulce

Parámetro	Expresado como	Unidad	Límite máximo permisible	Valor después de la simulación
Hidrocarburos Totales de Petróleo	TPH	mg/L	0,5	0,225
⁽¹⁾ Valores de referencia tomada de Acuerdo Ministerial N097, Libro VI de la Calidad Ambiental. Tabla 2: Criterios de calidad admisibles para la preservación de la vida acuática y silvestre en aguas dulce.				

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

3.10. Análisis de sensibilidad

Es importante realizar un análisis de sensibilidad con la finalidad de comprender cuales son las limitaciones o alcances de la simulación, para lo cual se han tomado en consideración las variables independientes (fracción molar de Cloro libre residual y N-hexano) en la alimentación y su concentraciones molares en el agua tratada como variables dependientes, consecuentemente el análisis de sensibilidad determinará los datos de las variables de entrada que proporcionarán un rango de alcance de la simulación, tal y como se describe a continuación:

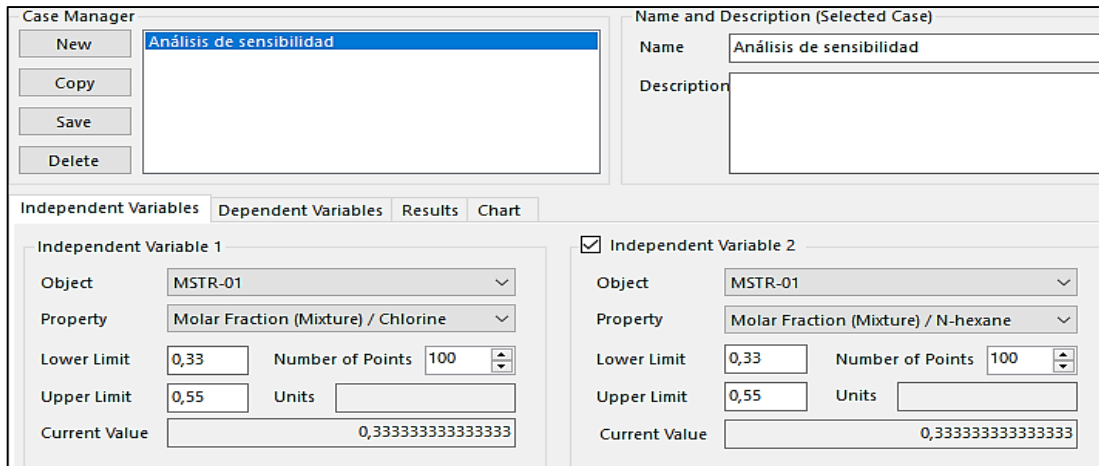


Ilustración 16-3: Variables independientes y sus rangos en el análisis de sensibilidad

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

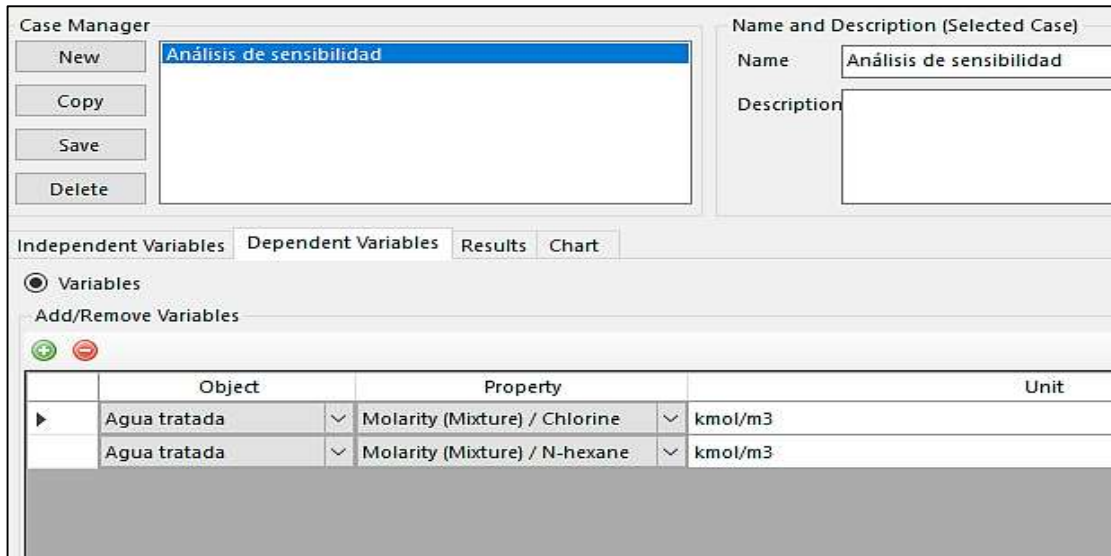


Ilustración 17-3: Variables dependientes en el análisis de sensibilidad

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Como se puede observar en la tabla 9-3, a medida que la fracción molar de los contaminantes va aumentando, la concentración de estos en el agua tratada disminuye significativamente, lo que permite determinar que el proceso trabaja de manera óptima al disminuir la concentración de cloro libre residual y de n-hexano en el agua del río Peripa.

Tabla 9-3: Resultados del análisis de sensibilidad

FRACCIÓN MOLAR EN LA ALIMENTACIÓN		CONCENTRACIÓN EN EL AGUA TRATADA (Mol/L)	
Cloro libre residual	N-hexano	Cloro libre residual	N-hexano
0,330	0,3300	$2,84 \times 10^{-8}$	$3,49 \times 10^{-21}$
0,333	0,3322	$8,91 \times 10^{-11}$	$5,01 \times 10^{-37}$

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

CAPÍTULO IV

4. GESTIÓN DEL PROYECTO

4.1. Presupuesto

Tabla 1-4: Presupuesto para el desarrollo del trabajo

PRESUPUESTO			
ACTIVIDAD	MONTO	FUENTE DE FINANCIAMIENTO	
		INTERNA	EXTERNA
Análisis Físicoquímico del agua	\$85,00	x	
Clases asistidas para DWSIM	\$100,00	x	
Impresión del documento final	\$30,00	x	
Copias e Impresiones	\$50,00	x	
Empastados	\$50,00	x	
Contratiempos	\$20,00	x	
TOTAL			\$335,00

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

4.2. Materiales

Tabla 2-4: Materiales

Equipo y software	Uso
Computadora	Simulación y redacción
DWSIM	Simulación

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

4.3. Cronograma

Tabla 3-4: Cronograma de actividades

ACTIVIDAD	MESES																			
	Noviembre				Diciembre				Enero				Febrero				Marzo			
	SEMANAS																			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Elaboración del anteproyecto				■	■	■	■	■												
Determinación de variables							■	■												
Obtención de datos experimentales del río Peripa									■	■	■	■								
Determinación de variables de proceso para simular									■	■	■	■								
Estructuración de las etapas de simulación									■	■	■	■	■							
Estudio técnico y económico											■	■	■	■						
Validación de la simulación mediante análisis de sensibilidad													■	■	■					
Redacción del trabajo final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Análisis de costos				■	■	■	■	■					■	■	■					
Revisión del documento final				■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■				
Auditoria Académica																	■	■		
Defensa de los resultados																			■	■

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

4.4. Discusión y análisis de resultados

4.4.1. Informe de resultados de la simulación en DWSIM

Se obtuvieron los siguientes resultados al simular el proceso de destilación en múltiples etapas y ósmosis inversa para la desalinización y purificación del agua del río Peripa en DWSIM:

En la tabla 4-4 se observa las condiciones que sale el agua tratada con un porcentaje de 0,9999 de fracción molar, estando dentro de la norma libre de cloro y hexano.

Tabla 4-4: Resultados en la corriente de agua tratada

Parámetro	Cantidad	Unidades
Temperatura	25	°C
Presión	1	atm
Densidad (Mezcla)	943,709	kg/m ³
Peso Molecular (Mezcla)	18,0153	kg/kmol
Entalpía Específica (Mezcla)	-3841,36	kJ/kg
Entropía Específica (Mezcla)	-16,543	kJ/[kg.K]
Fracción molar (Mezcla) / Agua	0,999999	
Fracción de masa (Mezcla) / Agua	0,999999	
Fracción molar (Mezcla) / Cloro	7,00E-08	
Fracción de masa (mezcla)/cloro	2,76E-07	
Fracción molar (Mezcla) / N-hexano	5,00E-08	
Fracción de masa (mezcla) / N-hexano	2,39E-07	
Molaridad (Mezcla) / Cloro	3,67E-06	mol/L
Molaridad (Mezcla) / N-hexano	2,62E-06	mol/L

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

En la tabla 5-4 se observa los resultados del hexano recuperado en el proceso simulado con una fracción molar 0,9494 bajo las mismas condiciones de temperatura de 25 grados centígrados, temperatura que sale de la corriente del hexano recuperado por el segundo separador para luego almacenarse en un tanque.

Tabla 5-4: Resultados en corriente de n-hexano

Parámetro	Cantidad	Unidades
Temperatura	25	°C
Presión	1	atm
Densidad (Mezcla)	674,957	kg/m ³
Peso Molecular (Mezcla)	85,4042	kg/kmol
Entalpía Específica (Mezcla)	-356,872	kJ/kg
Entropía Específica (Mezcla)	-1,03729	kJ/[kg.K]
Conductividad Térmica (Mezcla)	0,120146	W/[m.K]
Fracción molar (Mezcla) / Agua	1,22E-09	
Fracción de masa (Mezcla) / Agua	2,57E-10	
Fracción molar (Mezcla) / Cloro	5,05E-02	
Fracción de masa (mezcla)/cloro	4,19E-02	
Fracción molar (Mezcla) / N-hexano	0,949498	
Fracción de masa (mezcla) / N-hexano	0,958071	
Molaridad (Mezcla) / Cloro	0,399121	mol/L
Molaridad (Mezcla) / N-hexano	7,50396	mol/L

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

En la tabla 6-4 se observa las condiciones que se almacena el cloro que sale del primero y segundo separador, así como también de la tercera columna estas corrientes se dirigen a un cooler para poder enfriar y almacenarlo en estado líquido el cloro.

Tabla 6-4: Resultados en la corriente de cloro residual

Parámetro	Cantidad	Unidades
Temperatura	25	°C
Presión	1	atm
Peso Molecular (Mezcla)	70,8346	kg/kmol
Entalpía Específica (Mezcla)	0	kJ/kg
Entropía Específica (Mezcla)	0	kJ/ [kg. K]
Conductividad Térmica (Mezcla)	0,00897294	W/ [m.K]
Fracción molar (Mezcla) / Agua	1,31E-07	
Fracción de masa (Mezcla) / Agua	3,34E-08	
Fracción molar (Mezcla) / Cloro	0,99889	
Fracción de masa (mezcla)/cloro	0,99709	
Fracción molar (Mezcla) / N-hexano	-0,00467801	
Fracción de masa (mezcla) / N-hexano	-0,00569113	
Molaridad (Mezcla) / Cloro	0	mol/L
Molaridad (Mezcla) / N-hexano	0	mol/L

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

4.5. Validación de los resultados obtenidos en DWSIM

Tabla 7-4: Concentración de contaminantes en la alimentación de la simulación

Alimentación		
Object	MSTR-01	
Molarity (Mixture) / Chlorine	1,423567	mol/L
Molarity (Mixture) / N-hexane	1,423567	mol/L

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Tabla 8-4: Concentración de contaminantes en el agua tratada de la simulación

Resultados		
Object	Agua tratada	
Molarity (Mixture) / Chlorine	3,66686E-06	mol/L
Molarity (Mixture) / N-hexane	2,61919E-06	mol/L

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

De los resultados presentados en la tabla 7-4, la concentración de contaminantes cloro residual y n-hexano (TPH) se encuentran por debajo de los valores permisibles de 0,5 mg de contaminante

por litro de agua dulce. Se evidencia que el proceso de destilación en múltiples etapas y ósmosis inversa podría lograr un 99,99% de la remoción del cloro libre residual y n-hexano expresado como hidrocarburos totales del petróleo (TPH) presentes en el agua del río Peripa.

Tabla 9-4: Validación de la simulación

Corriente de Flujo	Parámetro	Unidades	Límite máximo permisible ⁽¹⁾	DWSIM Inicio	DWSIM Fin	Remoción (%)
Agua tratada	Molaridad del Cloro libre residual	mg/L	0,5	1,42	$3,7 \times 10^{-6}$	99,99
	Molaridad del N-hexano (TPH)	mg/L	0,5	1,42	$2,6 \times 10^{-6}$	99,99

⁽¹⁾ Valores de referencia tomada de Acuerdo Ministerial N097, Libro VI de la Calidad Ambiental. TPH, Tabla 2: Criterios de calidad admisibles para la preservación de la vida acuática y silvestre en aguas dulce. Cloro libre residual, Tabla 9: Límites de descarga a un cuerpo de agua dulce.

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

Es este gráfico de barras se observa el porcentaje de remoción de los contaminantes de cada contaminante al final se la simulación.

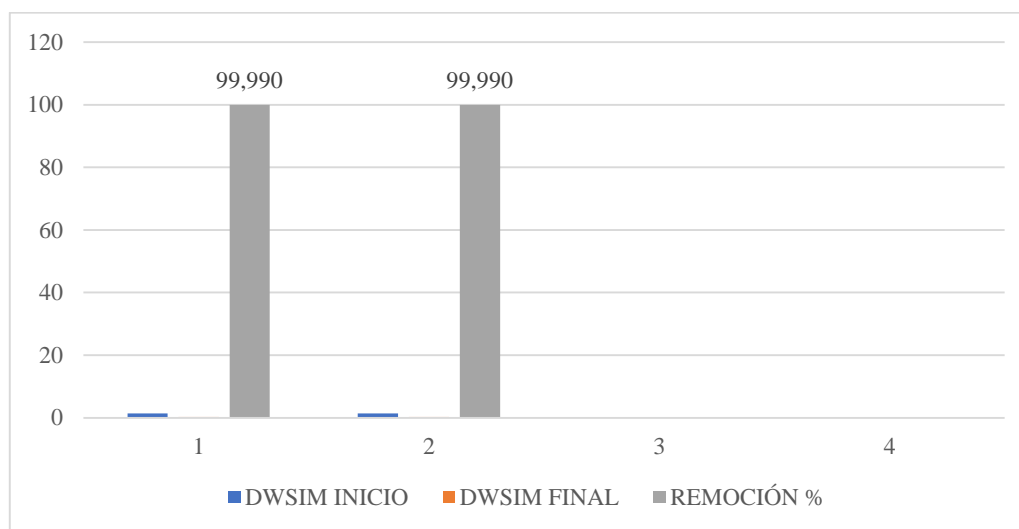


Ilustración 1-4: Porcentaje de remoción

Realizado por: Pincay, Oscar, 2022.

CAPÍTULO V

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones

Mediante caracterización fisicoquímica del agua proveniente del río Peripa se determinó que los contaminantes que se encuentran en el cuerpo hídrico son cloro 1.32 mg/l y 0.68 mg/l para TPH afectando directamente a la calidad del agua ya que los límites máximo-permisibles de acuerdo con la norma son 0.5 mg/l tanto para el cloro como para TPH.

Las variables para la simulación del proceso de destilado en múltiples etapas y ósmosis inversa en la desalinización y purificación del agua del río Peripa provincia de Santo Domingo son fracción molar de cloro libre residual en la alimentación, fracción molar de n-hexano (componente principal TPH) en la alimentación y las iniciales en el proceso presión de 1 atm, temperatura de 25°C y relación de alimentación Cl₂/N-HEX (TPH) de 1:1.

La optimización del proceso de destilado en múltiples etapas se realizó mediante el análisis de sensibilidad y los valores en la alimentación de los contaminantes antes y después del análisis de sensibilidad son cloro libre residual de 0,330 y de N- hexano 0,330 antes y 0,333 de cloro con 0,3322 de N-hexano en el después de la sensibilidad en la alimentación, mediante para lo cual se han tomado en consideración las variables independientes (fracción molar de Cloro libre residual y N-hexano) en la alimentación y su concentraciones molares en el agua tratada como variables dependientes.

Mediante la simulación del proceso de destilación y ósmosis inversa se determinó que el porcentaje de remoción de los contaminantes que son cloro residual y TPH son del 99,99 % por lo cumple con el límite máximo permisible con la normativa.

5.2. Recomendaciones

Realizar los análisis fisicoquímicos del agua en un periodo de 6 meses para determinar los valores de los contaminantes.

Se recomienda aplicar el modelo de simulación para ver que procesos pueden seguir el Gad parroquial de Puerto Limón para la mejorar la calidad de agua del río Peripa y además que se implemente el sistema simulado.

BIBLIOGRAFÍA

ASAMBLEA NACIONAL DEL ECUADOR. *Iusrectusecart*. Constitución de la República del Ecuador. [en línea]. 2008. 449 (), pp. 1-219. Disponible en: <https://bde.fin.ec/wp-content/uploads/2021/02/Constitucionultimodif25enero2021.pdf>.

BARRENECHEA, A. *Aspectos fisicoquímicos de la calidad del agua* [en línea]. 2009. Primera ed. LIMA – PERÚ: s.n. Disponible en: http://www.ingenieriasanitaria.com.pe/pdf/manual1/tomo1/ma1_tomo1_indice.pdf.

BIANCHI, E., DALZOCHIO, T., SIMÕES, L.A.R., RODRIGUES, G.Z.P., et. al. *Ecohydrology and Hydrobiology*. Water quality monitoring of the Sinos River Basin, Southern Brazil, using physicochemical and microbiological analysis and biomarkers in laboratory-exposed fish. [en línea]. 2019, vol. 19, no. 3, pp. 328-338. ISSN 20803397. DOI 10.1016/j.ecohyd.2019.05.002.

CADAVID, N. *Incidencia De La Selección Del Paquete Termodinámico En La Simulación Para El Diseño De Procesos En La Producción Del Formaldehído Y Estireno*. [en línea]. 2013. S.l.: Universidad EAFIT. Disponible en: https://repository.eafit.edu.co/bitstream/handle/10784/8227/NataliaAndrea_CadavidHernandez_2013.pdf?sequence=2&isAllowed=y.

DWSIM. *Cape-open*. CAPE-OPEN. 2019.

DWSIM. *Chemical Process simulator*. DWSIM - Chemical Process simulator. 2020.

FAJARDO, A. *Desalinización del agua: ¿una alternativa sostenible para la potabilización del agua?* [en línea]. 2018. S.l.: Fundación Universidad de América. Disponible en: https://www.google.com/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=&cad=rja&uact=8&ved=2ahUKEwiclZHG_sHwAhUjQhUIHeRqDUEQFjABegQIAhAD&url=http%3A%2F%2Frepository.uamerica.edu.co%2Fhandle%2F20.500.11839%2F7141&usg=AOvVaw3nYZ-uUyOjyAksFWVtWETL.

HERNANDEZ, L. *Influencia del tipo de dispositivo en la eficiencia de desalinización para la obtención de agua potable: una revisión sistemática entre 2010-2020* [en línea]. 2021. S.l.: Universidad Privada del Norte. Disponible en:

<https://repositorio.upn.edu.pe/handle/11537/25759>.

HIRSIMAKI, C., OUTRAM, J.G., MILLAR, G.J. & ALTAEE, A. Process simulation of high pH reverse osmosis systems to facilitate reuse of coal seam gas associated water. *Journal of Environmental Chemical Engineering* [en línea], 2020. 8(5), pp. 104122. ISSN 22133437. DOI 10.1016/j.jece.2020.104122. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104122>.

LEINO, M. *Process Simulation Unit Operation Models – Review of Open And Hsc Chemistry I / O Interfaces*. 2016.

MARTÍNEZ, E. *Simulación y estudio de contexto de una planta de desalación por ósmosis inversa en Arabia Saudita* [en línea]. 2019. S.l.: Universidad de Sevilla. Disponible en: https://idus.us.es/bitstream/handle/11441/99800/TFM-1377-MARTINEZ_PAREJO.pdf?sequence=1&isAllowed=y.

MISHCHUK, N.A., GONCHARUK, V. V. & VAKULENKO, V.F. *Advances in Colloid and Interface Science*. Theoretical analysis of physicochemical processes occurring during water treatment by ozone and ultraviolet radiation. [en línea]. 2008. 139(1-2), pp. 62-73. ISSN 00018686. DOI 10.1016/j.cis.2008.01.003.

PELLACANI, C., BUSCHINI, A., FURLINI, M., POLI, P. & ROSSI, C. *Aquatic Toxicology*. A battery of in vivo and in vitro tests useful for genotoxic pollutant detection in surface waters. [en línea]. 2006. 77(1), pp. 1-10. ISSN 0166445X. DOI 10.1016/j.aquatox.2005.10.010.

SARAI, M., SMALLBONE, A.J. & ROSKILLY, A.P. *Desalination*. A hybrid reverse osmosis/adsorption desalination plant for irrigation and drinking water. [en línea]. 2018. 444(December 2017), pp. 44-52. ISSN 00119164. DOI 10.1016/j.desal.2018.07.008. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.desal.2018.07.008>.

SIERRA, C. & ACEVEDO, R. *Manual de métodos analíticos para la determinación de parámetros fisicoquímicos básicos en aguas Marlon Enrique Castillo Bertel* [en línea]. 2013. Cartagena de Indias: s.n. Disponible en: <http://www.eumed.net/libros-gratis/2013a/1326/index.htm>.

SIHANG, L. & ZHENYU, L. *Reverse osmosis and forward osmosis in integrated systems* [en línea]. 2019. Primera ed. Yangling: Elsevier Inc. ISBN 9780128167779. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-816777-9.00011-3>.

YAMANEE-NOLIN, M., LÖFGREN, A., ANDERSSON, N., et. al. *Computer Aided Chemical Engineering*. Single-shooting optimization of an industrial process through co-simulation of a modularized Aspen Plus Dynamics model. [en línea]. 2019. 46 (), pp. 721-726. ISSN 15707946. DOI 10.1016/B978-0-12-818634-3.50121-1.

ZAPATA, A., CASCAJARES, M., ALCAYDE, A. & MANZANO, F. *Desalination* Worldwide research trends on desalination. [en línea]. 2022. 519(). August 2021, pp. 115305. ISSN 00119164. DOI 10.1016/j.desal.2021.115305. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.desal.2021.115305>.

ZHAI, Y., LIU, G. & VAN DER MEER, W. *Engineering*. One-Step Reverse Osmosis Based on Riverbank Filtration for Future Drinking Water Purification. [en línea]. 2021..no. xxxx. ISSN 20958099. DOI 10.1016/j.eng.2021.02.015. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.eng.2021.02.015>.





epoch

Dirección de Bibliotecas y
Recursos del Aprendizaje

UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y
DOCUMENTAL

REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA

Fecha de entrega: 27 / 03 / 2023

INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)
Nombres – Apellidos: OSCAR ALBERTO PINCAY AGUIRRE
INFORMACIÓN INSTITUCIONAL
Facultad: CIENCIAS
Carrera: INGENIERÍA QUÍMICA
Título a optar: INGENIERO QUÍMICO
f. Analista de Biblioteca responsable: Ing. Rafael Inty Salto Hidalgo

0609-DBRA-UTP-2023