



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA
CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**EFFECTO DE LOS OLIGÓMEROS DEL ÁCIDO LÁCTICO
SUJETO A REACCIONES DE ESTERIFICACIÓN EN UNA
COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA**

TESIS

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
INGENIERO QUÍMICO
PRESENTA:
FABIAN ALEJANDRO OJEDA RUIZ**

JURADO DE EXAMEN

**DIRECTOR: DR. FRANCISCO VIDAL CABALLERO DOMÍNGUEZ
ASESOR: I.Q. ALDO VARELA MARTÍNEZ
ASESORA: DRA. BLANCA ESTELA GARCÍA ROJAS
SINODAL: I.Q. ALEXIS MARCO ROMERO PEREZ
SINODAL: MTRO. FRANCISCO JAVIER ALMAZAN RUIZ**



CIUDAD DE MÉXICO

OCTUBRE 2023



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICATORIAS

A mis padres quiénes han estado conmigo en todo momento.

A mi mamá por guiarme y apoyarme a ser mejor persona enseñándome hábitos y valores los cuales me han permitido seguir adelante.

A mis hermanos Magdalena y Pablo por compartir muy buenos momentos juntos y experiencias que nunca olvidaré.

A mi sobrino Carlos por llenarme de energía.

A los maestros que me enseñaron no solo conocimientos de la materia, si no conocimientos de la vida, para ser una persona con ética.

AGRADECIMIENTO

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México y a la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza por brindarme los conocimientos y herramientas necesarios para concluir las investigaciones imprescindibles durante el proceso de este proyecto.

A la dirección general de asuntos del personal académico (DGAPA), dirección de apoyo a la docencia mediante el programa de apoyo a proyectos para innovar y mejorar la educación (PAPIME) con clave PE 111820 denominado: Reestructuración y rehabilitación del laboratorio de Investigación de Ingeniería Química

Al director de mi tesis el Dr. Francisco, a mis dos asesores, el I.Q. Aldo y la Dra. Blanca, y a los sinodales, el I.Q. Alexis Marco Romero Pérez y el MTRO. Francisco Javier Almazán Ruiz por apoyarme y guiarme en el proceso de elaboración de este trabajo.

RESUMEN

En el presente trabajo se analiza el efecto de los oligómeros del ácido láctico en reacciones de esterificación para la producción del éster lactato de etilo en una columna de destilación reactiva. Para ello se simularon en el software Aspen Plus V11 3 columnas de destilación reactiva a las mismas condiciones, empleando el modelo RADFRAC, en donde la primera columna (CDR 1) no se añadió ningún oligómero, la segunda columna (CDR 2) un oligómero y la tercera columna (CDR 3) dos oligómeros. Los resultados indican que hay diferencias significativas entre la CDR 1 contra las otras dos columnas (CDR 2 y CDR 3), referente al perfil de temperaturas de la columna, así como en el perfil de composiciones. En el caso de la simulación de la CDR 2 contra la CDR 3 se observa pequeñas diferencias, pero tienen aproximadamente el mismo comportamiento.

INDICE

DEDICATORIAS.....	I
AGRADECIMIENTOS.....	II
RESUMEN	III
<u>CAPITULO I. INTRODUCCIÓN.....</u>	<u>1</u>
1.1 OBJETIVO GENERAL	2
1.1.1 Objetivos Específicos	2
1.2 ESTRUCTURA DEL TRABAJO	2
<u>CAPITULO II. MARCO TEÓRICO</u>	<u>4</u>
<u>2.1 REACTIVOS Y PRODUCTOS</u>	<u>4</u>
2.1.1 Ácido Láctico (LA)	4
2.1.2 Etanol	5
2.1.3 Lactato de Etilo (LE)	5
<u>2.2 FORMACIÓN DE LOS OLIGÓMEROS DEL AL</u>	<u>6</u>
2.2.1 Reacciones de formación.....	6
2.2.2 Distribución de los oligómeros en soluciones acuosas	8
<u>2.3 PRODUCCIÓN DEL LACTATO DE ETILO</u>	<u>9</u>
2.3.1 Reacciones de esterificación implicadas	9
2.3.2 Catalizador Amberlyst 15®	10
2.3.3 Cinética de las reacciones implicadas	12
<u>2.4 DESTILACIÓN REACTIVA</u>	<u>14</u>
2.4.1 Características Generales	14
2.4.2 Empaques y parámetros hidráulicos	16
<u>2.5 ANTECEDENTES</u>	<u>21</u>
<u>CAPITULO III. METODOLOGÍA</u>	<u>23</u>
3.1 RECABACIÓN DE INFORMACIÓN	23
3.2 SIMULACIÓN	23
<u>CAPITULO IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN</u>	<u>32</u>
<u>4.1 SIMULACIÓN 1 (SIN OLIGÓMEROS)</u>	<u>32</u>
<u>4.2 SIMULACIÓN 2 (1 OLIGÓMERO)</u>	<u>36</u>

4.3 SIMULACIÓN 3 (2 OLIGÓMEROS)	39
4.4 ANÁLISIS DE RESULTADOS	41
III. CONCLUSIONES	46
IV. REFERENCIAS	47
V. ANEXOS	50
ANEXO 1: AÑADICIÓN DE LOS OLIGOMEROS AL SIMULADOR	50
ANEXO 2: ALGORITMO DE ERIC CARLSON	53
ANEXO 3: PARÁMETROS BÁSICOS DE LA COLUMNA	55
ANEXO 4: PARÁMETROS HIDRÁULICOS	57
Anexo 4.1: Método de Brown - Souder	57
Anexo 4.2: Calculo de h_L y ΔP	58

CAPITULO 1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad se requieren producir sustancias amigables con el ambiente debido al aumento de contaminación que se presenta en el mundo, en gran parte se debe al uso de compuestos fósiles, por ende se buscan nuevas alternativas para disminuir desechos y reemplazar productos de origen fósil por productos renovables, una de ellas es el Lactato de Etilo (LE), desafortunadamente la mayoría de trabajos referentes a la producción de este éster no contemplan los oligómeros del Ácido Láctico (AL) en el proceso con el argumento de tener un exceso de 3:1 de etanol en la esterificación de LE y utilizando una solución de 88 %W de AL, hace que se produzcan menos concentraciones de oligómeros y a su vez de polímeros de LE (Pereira et. Al., 2008).

Comúnmente en los trabajos sobre el proceso de esterificación para la producción del LE la reacción y la separación se llevan en un reactor y en una columna de destilación respectivamente, pero al ser una reacción de esterificación y al cumplir con ciertos requisitos se puede emplear una columna de destilación reactiva (CDR), en donde la reacción y la separación ocurren en el mismo equipo y esto es un claro ejemplo de intensificación de procesos.

Con base a lo anterior, este proyecto pretende fijar bases y condiciones para producir LE a partir de Etanol y LA, incluyendo 2 oligómeros de este último compuesto en una columna de destilación reactiva empleando el software Aspen Plus v11.

1.1 OBJETIVO GENERAL

El objetivo de este trabajo es establecer el efecto de los oligómeros del ácido láctico sujeto a reacciones de esterificación en una columna de destilación reactiva.

1.1.1 Objetivos Específicos

A continuación, se enuncian los objetivos específicos:

- Enunciar los balances de materia y energía necesarios para realizar las simulaciones de las reacciones de esterificación en una columna de destilación reactiva.
- Revisar y reconocer las principales herramientas del software Aspen Plus dirigidas a la simulación de columnas de destilación reactiva.
- Utilizar las herramientas para la construcción de moléculas y generar los oligómeros para estimar sus propiedades e incluirlos en la reacción de esterificación.
- Evaluar una columna de destilación reactiva sin oligómeros.
- Evaluar una columna de destilación reactiva con un aumento gradual de oligómeros.
- Enunciar las principales diferencias de las simulaciones realizadas y validar de manera directa o indirecta los resultados.

1.2 ESTRUCTURA DEL TRABAJO

El presente trabajo consta de 4 capítulos que se describen a continuación.

El Capítulo 1 es la introducción, en donde se tendrá un panorama general sobre el trabajo.

El Capítulo 2 consta del marco teórico necesario junto con los antecedentes sobre el tema para tener una mayor comprensión del trabajo.

El Capítulo 3 describe la metodología que se manejó en donde se abarcaran todos los aspectos que se consideraron en las simulaciones de la columna de destilación reactiva (CDR) en el software Aspen Plus.

En el Capítulo 4 se discuten y analizan los resultados numéricos y gráficos obtenidos a partir de las simulaciones.

CAPITULO 2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se pondrán todos los fundamentos necesarios para establecer el tema de estudio.

2.1. REACTIVOS Y PRODUCTOS

En este apartado se describirán los reactivos y los productos implicados en la reacción.

2.1.1. Ácido Láctico (LA)

El ácido láctico ($C_3H_6O_3$) es un ácido orgánico muy importante, desde procesos biológicos como intermediario en el metabolismo de la glucosa (Vélez P., 2017), hasta aplicaciones a nivel macro, como en la industria de alimentos, farmacéutica y química, además tiene un gran potencial como materia prima en procesos de producción de polímeros biodegradables y amigables con el ambiente (Serna C., Rodríguez S., 2005).

En la Tabla 2.1.1 se muestran las propiedades fisicoquímicas del ácido láctico obtenidas a través de una ficha técnica (FARMA-QUÍMICA SUR S.L., s.f.)

Tabla 2.1 Propiedades fisicoquímicas del ácido láctico

<u>PROPIEDAD</u>	<u>CANTIDAD</u>	<u>UNIDADES</u>
Peso Molecular	90.1	$Kg/Kmol$
Densidad	1.200	Kg/L
Punto de Fusión	17	°C
Punto de Ebullición	122	°C
Punto de Inflamación	>110	°C
índice de Refracción	>1.4226	

2.1.2. Etanol

El etanol (C_2H_6O) también conocido como alcohol etílico, es una sustancia líquida incolora y volátil. Tiene varios usos, los más comunes son a nivel industrial, doméstico y área de la salud. En la parte industrial se emplea como solvente, como medio de reacciones químicas y además empleado como materia prima para reacciones de síntesis (Cadena Agroindustrial, 2004). También es catalogado como biocombustible ya que es un recurso renovable y al ser producida a partir de biomasa, disminuye en gran forma las cantidades de nafta (Alvarez S, 2008)

En la tabla 2.1.2 se muestran las propiedades fisicoquímicas del etanol a partir de las hojas de seguridad de la Facultad de Química UNAM.

Tabla 2.2 *Propiedades fisicoquímicas del ácido láctico*

<u>PROPIEDAD</u>	<u>CANTIDAD</u>	<u>UNIDADES</u>
Peso Molecular	46.07	$Kg/Kmol$
Densidad	0.7893	Kg/L
Punto de Fusión	-130	$^{\circ}C$
Punto de Ebullición	78.3	$^{\circ}C$
Punto de Inflamación	>12	$^{\circ}C$
índice de Refracción	1.361	

2.1.3. Lactato de Etilo (LE)

El lactato de etilo ($C_5H_{10}O_3$) también conocido como eti-L-lactato, es un éster orgánico producido mediante una reacción de esterificación entre el ácido láctico y el etanol, no es tóxico, es biodegradable y tiene excelentes propiedades como solvente verde (Gao J., 2007), siendo capaz de reemplazar disolventes como tolueno, acetona, xileno, etc. Por tanto, es una alternativa para solventes clorados, tóxicos y agresivos con la salud y el medio ambiente (Ramírez B., 2011).

En la tabla 2.1.3 se muestran algunas propiedades fisicoquímicas del lactato de etilo obtenidas a partir de las fichas de seguridad de la empresa Scharlau Chemie. (S.C., 2021).

Tabla 2.3 *Propiedades fisicoquímicas del lactato de etilo*

<u>PROPIEDAD</u>	<u>CANTIDAD</u>	<u>UNIDADES</u>
Peso Molecular	118.13	$Kg/Kmol$
Densidad	1.03	Kg/L
Punto de Fusión	-9	°C
Punto de Ebullición	154	°C
Punto de Inflamación	53	°C
índice de Refracción	1.411	

2.2. FORMACIÓN DE LOS OLIGÓMEROS DEL AL

En este apartado se dan a conocer los aspectos relacionados con la formación de los oligómeros del ácido láctico.

2.2.1. Reacciones de formación

Debido a su naturaleza auto catalítica, el ácido láctico presenta una esterificación intermolecular en soluciones acuosas concentradas, formándose los oligómeros. (Asthana N.S. et al., 2006), además las altas temperaturas promueven a esta oligomerización y en este proceso se inicia a partir de dos moléculas del ácido láctico que reaccionan entre ellas formando una molécula del dímero de ácido láctico (AL2) más una molécula de agua. Y posteriormente este oligómero AL2 reacciona con una molécula de ácido láctico produciendo más agua y una molécula de trímero de ácido láctico (AL3) y esta secuencia se puede repetir hasta formarse oligómeros de cadenas superiores al AL4. (Fields N. et al., 2007).

A continuación, se presentan las reacciones de esterificación para la formación de AL2 y AL3 (Fields N. et al.,2007);

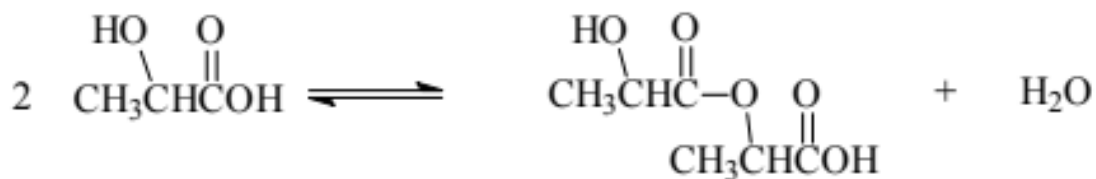


Figura 2.1 *Reacción de formación de AL2*

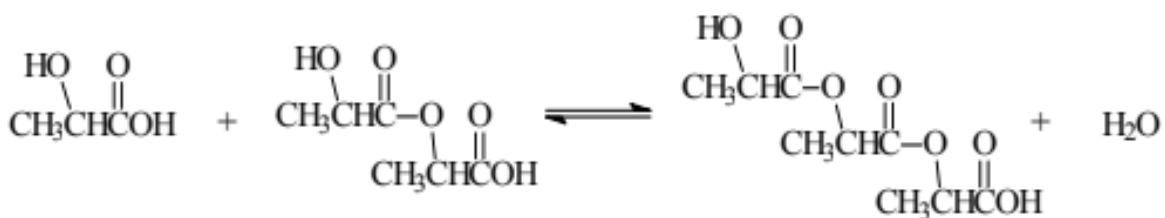
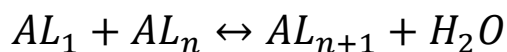


Figura 2.2 *Reacción de formación de AL3*

Con base a lo anterior se puede escribir una fórmula general que describa el proceso de oligomerización del ácido láctico, la cual se muestra a continuación



En donde:

AL_1 = Ácido Láctico

AL_n = Ácido Láctico (Oligómero de n cadena)

AL_{n+1} = Ácido Láctico (Oligómero de n+1 cadena)

2.2.2. Distribución de los oligómeros en soluciones acuosas

Las soluciones acuosas de ácido láctico en condiciones a altas temperaturas tienden a formar oligómeros, y la concentración de estos oligómeros tiende a aumentar en relación con la concentración de ácido láctico en la solución acuosa.

En la Tabla 2.4 se muestra la distribución de los oligómeros a diferentes concentraciones de soluciones acuosas de ácido láctico.

Tabla 2.4 Distribución de oligómeros en soluciones acuosas de AL %w/w (Vu D.T., 2005).

AGUA	AL	AL1	AL2	AL3	AL4	AL5	AL6	AL7	AL8	AL9	AL10	AL11+
95	5	4.98	0.019	0	0	0	0	0	0	0	0	0
90	10	9.91	0.079	0.001	0	0	0	0	0	0	0	0
85	15	14.8	0.187	0.002	0	0	0	0	0	0	0	0
80	20	19.6	0.35	0.005	0	0	0	0	0	0	0	0
75.1	24.9	24.3	0.575	0.011	0	0	0	0	0	0	0	0
70.1	29.9	29	0.874	0.021	0	0	0	0	0	0	0	0
65.1	34.9	33.6	1.26	0.038	0.001	0	0	0	0	0	0	0
60.2	39.8	38	1.75	0.064	0.002	0	0	0	0	0	0	0
55.3	44.7	42.3	2.35	0.105	0.004	0	0	0	0	0	0	0
50.4	49.6	46.3	3.11	0.167	0.008	0	0	0	0	0	0	0
45.5	54.5	50.2	4.03	0.26	0.015	0.001	0	0	0	0	0	0
40.6	59.4	53.8	5.18	0.4	0.028	0.002	0	0	0	0	0	0
35.8	64.2	56.9	6.58	0.611	0.051	0.004	0	0	0	0	0	0
31.1	68.9	59.6	8.31	0.931	0.094	0.009	0.001	0	0	0	0	0
26.4	73.6	61.5	10.4	1.42	0.175	0.02	0.002	0	0	0	0	0
21.9	78.1	62.5	13	2.18	0.33	0.047	0.007	0.001	0	0	0	0
17.5	82.5	62.2	16.2	3.37	0.636	0.113	0.019	0.003	0.001	0	0	0
13.3	86.7	60.1	19.8	5.23	1.25	0.282	0.061	0.013	0.003	0.001	0	0
9.49	90.51	55.4	23.6	8.04	2.48	0.725	0.204	0.056	0.015	0.004	0.001	0
6.2	93.8	47.6	26.6	11.9	4.83	1.85	0.684	0.246	0.087	0.03	0.01	0.005
3.61	96.39	36.6	27	16	8.56	4.34	2.21	1.01	0.469	0.216	0.098	0.079
1.79	98.21	23.7	22.9	17.7	12.4	8.21	5.24	3.25	1.98	1.19	0.708	0.989
0.689	99.311	11.6	14.3	14.1	12.5	10.6	8.58	6.79	5.27	4.03	3.05	8.55
0.149	99.851	3.09	4.67	5.66	6.22	6.45	6.44	6.27	5.99	5.64	5.25	44.2
0.0219	99.9781	0.506	0.853	1.15	1.41	1.63	1.82	1.97	2.1	2.2	2.29	84.1

De acuerdo con Vu (2005) las soluciones de ácido láctico se prepararon a partir de mezclar agua y ácido láctico y posteriormente las diferentes soluciones de AL se

calentaron durante 1 semana a 80 °C, por último, se emplearon 3 técnicas analíticas de caracterización las cuales son: GC, GC/MS y HPLC, con el fin de obtener la composición del ácido láctico y sus oligómeros en cada solución.

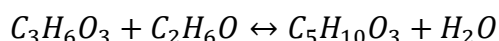
En las simulaciones se empleará una alimentación de AL al 88% w/w debido a que se maneja este porcentaje en el mercado.

2.3. PRODUCCIÓN DEL LACTATO DE ETILO

En esta sección, se darán a conocer la reacción de esterificación general en el proceso de producción del lactato de etilo, además el catalizador empleado con su respectiva cinética química.

2.3.1. Reacciones de esterificación

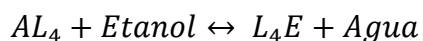
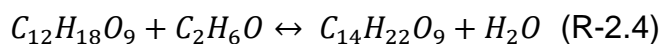
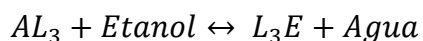
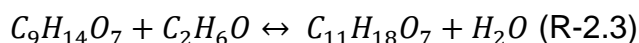
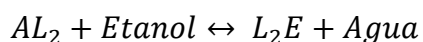
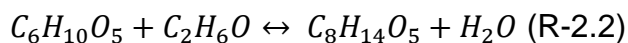
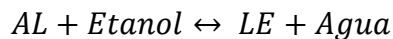
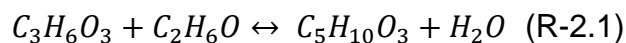
La reacción general para producir lactato de etilo se muestra a continuación;



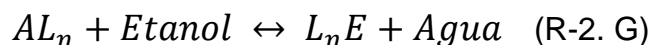
Reaccionan el ácido láctico y el etanol para formar lactato de etilo más agua. Este tipo de reacciones reciben el nombre de esterificación debido a que se produce un éster más agua.

Las reacciones de esterificación son reversibles y endotérmicas. Este tipo de reacciones se favorecen mediante ambientes ácidos, incrementando la temperatura limitada por alguno de los reactantes y un exceso de un reactivo, (Sánchez F.J., 1995), en este caso el reactivo en exceso es el etanol.

Cuando se forman los oligómeros de AL, estos pueden reaccionar con el etanol, formando polímeros de bajas cadenas del lactato de etilo, por lo consiguiente, disminuye la eficiencia de la reacción en relación con la producción del lactato. En las siguientes reacciones se muestran la formación de los polímeros de lactato de etilo debido a la presencia de los oligómeros; (Fields N. et al., 2007).



Por lo tanto, estas reacciones se pueden expresar de forma general con la siguiente fórmula:



2.3.2. Catalizador Amberlyst 15™

En procesos de esterificación se utilizan sustancias ácidas como catalizador, en este caso se empleara el catalizador Amberlyst 15™ el cual es una resina iónica fuertemente ácida en forma de perlas desarrollado particularmente para catálisis heterogénea ácida y tiene aplicaciones en varias reacciones orgánicas como son la alquilación, esterificación, eterificación, condensación e hidrolisis, además es útil en sistemas de intercambio iónico en medio acuoso para la eliminación de impurezas catiónicas. (DUPONT, 2020).

En la siguiente tabla se muestra las propiedades y características del catalizador Amberlyst 15™:

Tabla 2.5 Características y condiciones de operación sugeridas del catalizador Amberlyst 15 (DUPONT, 2005).

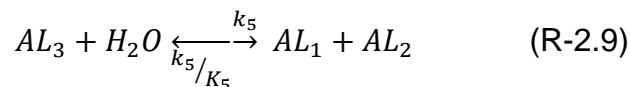
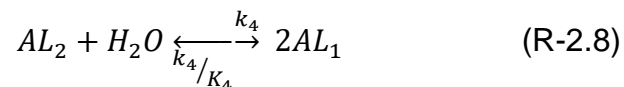
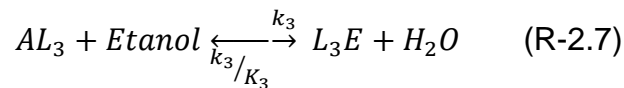
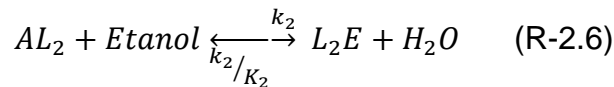
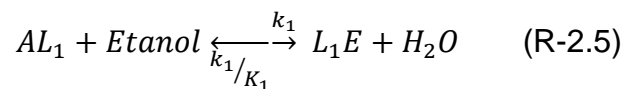
CARACTERÍSTICA	DESCRIPCIÓN
Forma física	Perlas esféricas, opacas y grises
Forma iónica de transporte	H+
Concentración de sitios ácidos	≥4.70 eq/Kg
Catalizadores volátiles	≤1.6%
Peso de transporte	610 g/L
Tamaño de partículas finas	<300µm ≤0.5% <425µm ≤2.0%
Expansión	Seco a fenol 38%
Nitrógeno BET	
Área Superficial	53 m ² /g
Diámetro de poro promedio	300Å
Volumen total del poro	0.40 cc/g
CONDICIONES	DESCRIPCIÓN
Temperatura máxima de funcionamiento	120°C (250 °F) en medios no acuosos
Profundidad mínima del lecho	600 mm (2ft)
Caída de presión máxima	1 bar (15 psig) a lo largo del lecho
Caudales	
Velocidad espacial lineal por hora (LHSV)	0.5-5h ⁻¹

Este catalizador se regenera mediante lavados de ácido clorhídrico (4-10% w/w) o ácido sulfúrico (1-5% w/w) y debe de cambiarse con una periodicidad de 3 a 5 años según Dow Chemical Barranquilla. (Arroyave et al. 2015).

2.3.3. Cinética de las reacciones implicadas.

Las reacciones de esterificación utilizando resinas iónicas se pueden describir por modelos homogéneos heterogéneos y pseudohomogéneos (PH). El modelo PH supone una expansión completa del catalizador y en consecuencia aumenta la facilidad de acceso de los reactivos a los sitios activos, pero no considera los efectos de la absorción en la resina de los diferentes reactivos. Hay un modelo de Langmuir-Hinshelwood (LH) que incluye este efecto de absorción (Avedano et al., 2018). También se puede plantear un modelo simple de reacción reversible de n-ésimo orden para describir la esterificación del ácido láctico utilizando como catalizador la resina iónica Amberlyst 15, y este último modelo se selecciona, debido a que existe una incertidumbre en el caso del modelo LH en la zona de la fase líquida dentro de la resina de intercambio catiónico Amberlyst 15 ya que al colocar soluciones acuosas que contienen ácido láctico y etanol, el catalizador se hincha debido a la absorción selectiva del agua (Fields N. et al., 2007).

A continuación, se presentan las 5 reacciones reversibles que describen la formación del lactato de etilo más dos oligómeros de AL y dos oligómeros del LE. Para mayor detalle consultar Fields N. et al. (2007).



La velocidad de formación de cada componente está plasmada en el trabajo de Fields N. et al. (2007), y de igual manera se muestran los resultados de las

constantes de velocidad del modelo cinético los cuales están presentes en la siguiente tabla:

Tabla 2.6 Constantes de velocidad del modelo cinético (Fields N. et al., 2007).

PARAMETRO	UNIDAD	VALORES
k_1	$kg_{sol}^2/kg_{cat} /s$	1.91×10^6
k_2	$kg_{sol}^2/kg_{cat} /s$	2.66×10^5
k_3	$kg_{sol}^2/kg_{cat} /s$	1.24×10^8
k_4	$kg_{sol}^2/kg_{cat} /s$	1.62×10^5
k_5	$kg_{sol}^2/kg_{cat} /s$	6.67×10^4
E_{A1}	$KJ/Kmol$	48000
E_{A2}	$KJ/Kmol$	54500
E_{A3}	$KJ/Kmol$	74100
E_{A4}	$KJ/Kmol$	52000
E_{A5}	$KJ/Kmol$	50800
K_1		2.4
K_2		0.6
K_3		0.3
K_4		5
K_5		5

Los factores, las energías de activación y las constantes de equilibrio se ajustaron con valores experimentales. Por tanto, estos parámetros cinéticos se emplearán en este trabajo.

2.4. DESTILACIÓN REACTIVA

En las últimas décadas se ha desarrollado en varios procesos la intensificación de procesos (IP), con la intención de disminuir costos de operación y reducir el impacto ambiental. (Tsatse et al., 2021). Un ejemplo de intensificación es la destilación reactiva (DR), en donde dos operaciones sumamente importantes en la industria química, como la reacción y la separación se presentan en la misma unidad de proceso. (Cardona et al., 2004).

2.4.1. Características generales

La DR se da en una columna de destilación reactiva (CDR), la cual presenta 3 zonas, la primera es la zona de rectificación, la segunda es la zona reactiva, y la tercera zona es la de agotamiento, también tiene dos alimentaciones como se puede apreciar en la Figura 2.3:

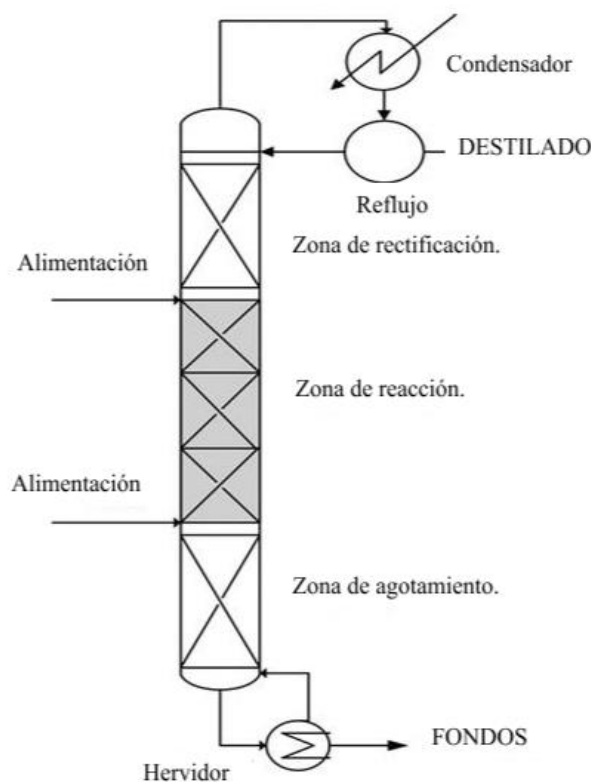


Figura 2.3. Configuración de una CDR

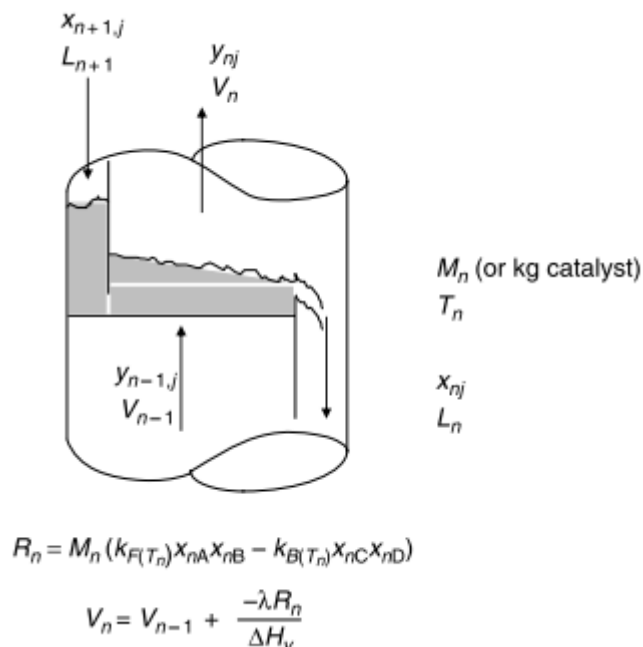


Figura 2.4. Etapa Reactiva (Luyben, Yu, 2008)

En una CDR las alimentaciones se colocan en función de los puntos de ebullición y volatilidades de los reactivos, entre la zona de reacción y la zona de agotamiento se agrega la alimentación que contiene reactivos de alta volatilidad y temperaturas de ebullición bajas. Entre la zona de reacción y la zona de enriquecimiento se alimenta(n) con el(los) componentes con baja volatilidad o puntos de ebullición más altos.

En la figura 2.4. se muestra el diagrama de una etapa reactiva con las variables implicadas tales como flujos del L y V de cada componente, así como el tiempo de retención del líquido (hL) o cantidad del catalizador (M_n), la temperatura (T).

La DR es más compleja que la destilación normal, debido a que se deben de agregar varios aspectos, uno de ellos es el catalizador, y esto determinan los componentes internos de la columna y a su vez la posición de la zona reactiva (Meza, 2009). Algunas especificaciones para tomar en cuenta en el diseño de una CDR se dan a continuación; (Carballo, 1997).

- La reacción debe proceder, juntamente con un equilibrio de fases en un mismo intervalo de presión y temperatura.

- Las fases del líquido y de vapor deben de estar en equilibrio en cada etapa.
- La fase líquida es homogénea.
- La reacción solo tiene lugar en la fase líquida.
- El equilibrio químico no se alcanza, la generación de los productos depende de la velocidad con que la reacción sucede, pero también de la cantidad de fase líquida presente en cada etapa reactiva o del área del catalizador si la reacción es heterogénea.
- El alcance de los equilibrios de fases y reacción han de lograrse en tiempos razonables de operación.

Las limitantes generales para el uso de la destilación reactiva son la siguientes:

- Discrepancia entre la temperatura que es favorable con la reacción y la temperatura que es favorable con la separación.
- Volatilidades desfavorables de los compuestos que conforman la reacción o reacciones.
- Tasas lentas de reacción aumentan el costo debido al incremento de las etapas reactivas.
- Se limita a reacciones en fase líquida, ya que en la fase vapor hay poca retención.

Para un proceso de esterificación como es la producción del lactato de etilo no existen estas limitantes, por ende, se puede llevar a cabo la destilación reactiva para su producción.

2.4.2. Empaques y parámetros hidráulicos

En todo proceso de separación reactiva juega un papel muy importante la elección del empaque para la columna, ya que la eficiencia se ve reflejada en el tiempo de residencia, la retención líquida, la caída de presión y la transferencia de masa, entre otras cosas.

Un empaque es parte del relleno de una columna que sirve para garantizar el contacto entre las fases líquida y gas. Para la elección de un empaque se deben de tomar en cuenta las siguientes características (Mendoza G., 2010):

- Proporcionar una gran área superficial para maximizar el área de contacto entre el líquido y el gas (vapor).
- Maximizar la porosidad por unidad de volumen, lo cual ayuda a disminuir la resistencia del gas a que fluya en los canales del empaque y permiten mayores volúmenes de fluido a través de la columna.
- Minimizar la fricción y que sea estructuralmente fuerte, de tal manera que se tenga una manipulación más práctica al instalarlos.
- Sea químicamente inerte con los fluidos que se están utilizando.

Los empaques se clasifican de la siguiente manera (Villavicencio M., 2018)

- Empaques aleatorios
- Empaques monolíticos
- Empaques estructurados
- Empaques estructurados catalíticos

Los empaques aleatorios son generalmente estructuras de cerámica, metal y plásticos, que usualmente se caracterizan por su tamaño nominal o diámetro, este tipo de empaques se emplean en procesos como la destilación reactiva heterogénea, en absorción, extracción y transferencia de calor. Se encuentran en diferentes geometrías como: anillos cilíndricos, esferas, monturas, entre otros más modernos como los anillos Pall, anillos Nutter, etc.

En la Figura 2.5, se muestra el desarrollo de algunos empaques aleatorios.

Son usadas ampliamente en aplicaciones prácticas para diámetros de columna mayores de 50 cm y una de sus ventajas es ofrecer bajas caídas de presión y un amplio intervalo de operación.

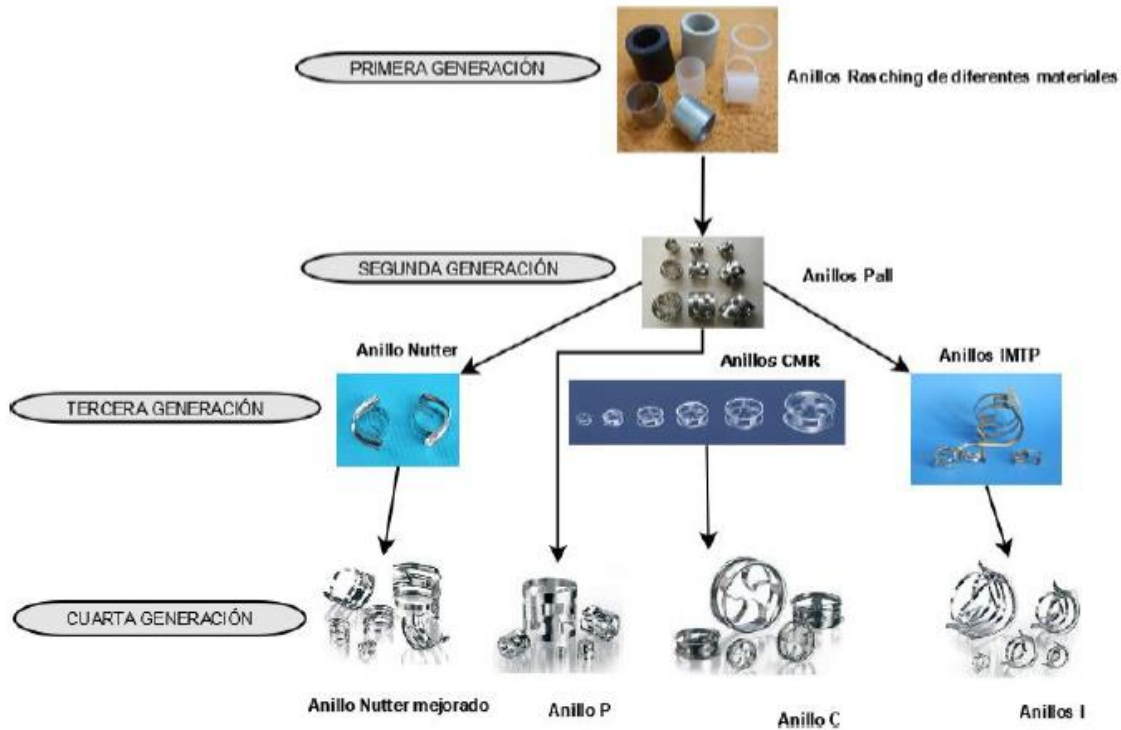


Figura 2.5. Desarrollo de algunos empaques aleatorios (Villavicencio M., 2018)

Los empaques monolíticos son estructuras tipo bloques, tienen pequeños canales que contienen material catalítico, en donde se transportan los reactivos y productos en forma convectiva. Se utilizan en operaciones de separación heterogénea, usualmente este tipo de empaques tiene una densidad de celdas medida como el número de celdas en forma de canal por pulgada cuadrada (cps), y el espesor de la pared. En la Figura 2.6. se muestran las formas de los canales de los monolíticos, comúnmente son en forma cuadrada, rectangular, hexagonal o triangular.

Las características de este empaque son fracción de huecos, área frontal abierta (OFA), área de la superficie geométrica (GSA) y diámetro hidráulico.

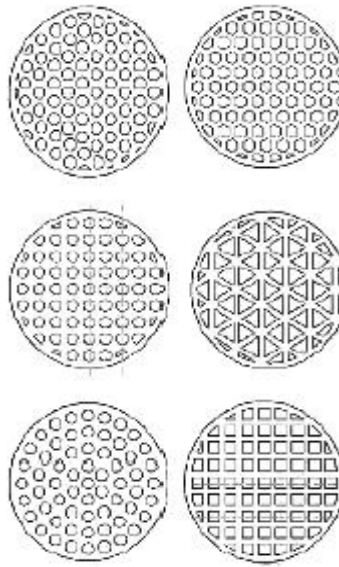


Figura 2.6. *Formas de canales en los empaques monolíticos. (Villavicencio M, 2018)*

Los empaques estructurados tienen una mayor área superficial comparados con los empaques aleatorios, proveen un mejor desempeño, el coeficiente de transferencia de masa global es mucho mayor, también reducen la caída de presión por etapa teórica, pero la desventaja es el costo y el transporte es más complicado ya que se pueden romper la estructura del empaque. En general este tipo de empaques se pueden clasificar en dos tipos: empaques de hojas metálicas y empaques de gasa. En la Figura 2.7 se presenta la geometría de los canales y dimensiones.

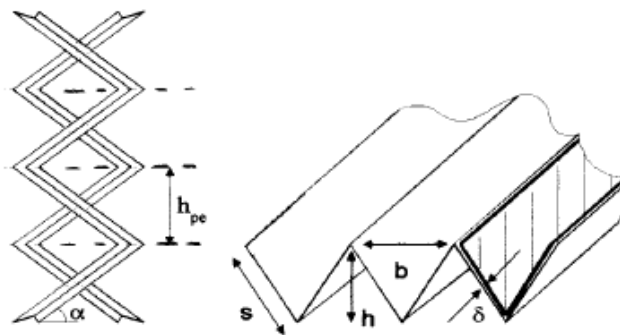


Figura 2.7. *Geometría de los canales de empaques estructurados. (Villavicencio María, 2018)*

Los empaques de hojas metálicas están compuestos por una cantidad de hojas organizadas una con otra. En esta clasificación se encuentran empaques como Montz-pak tipo B1®, empaques Flexipac® y empaques de Sulzer. El empaque más común de Sulzer es el MellapakPlus®, este empaque provee caídas de presión por plato teórico entre 0.3 a 1 mbar, caídas de presión de 2mbar/m entre 70% al 80% de inundación, en un intervalo de 0.2-200 m^3/m^2h de cargas de líquido, con áreas específicas desde 64 a 752 m^2/m^3 .



Figura 2.8. *Empaque MellapakPlus®. (Sulzer).*

Las variables hidráulicas que surgen con el empacamiento son muy importantes en el diseño de la columna de destilación reactiva, entre las de mayor interés se encuentran:

- Fracción de espacios vacíos: Es una variable que está dada por el tipo de empaque. Los empaques con grandes espacios vacíos tienen por

consecuencia disminuir las caídas de presión y promover una mayor eficiencia en la transferencia de masa entre el líquido y el gas (o vapor)

- Caída de presión: Es la diferencia de presión debido a roces (fricción) a lo largo del trayecto del fluido, en este caso es la pérdida de presión en la columna. Existen dos caídas de presión al estar en un empaque, la caída de presión seca (CPS) y la caída de presión rígida (CPR). La primera se obtiene al dejar pasar solo la fase gas al lecho empacado y la segunda está en función a la geometría del empaque y al gasto de gas.
- Volumen de retención del líquido: Se define como el espacio ocupado por películas y gotas líquidas de la alimentación en cada etapa de la columna.

2.5. ANTECEDENTES

El lactato de etilo es un solvente que durante las últimas décadas ha sido sujeto de diferentes investigaciones, la primera fue en el año de 1957 en donde se aborda la cinética de reacción del ácido láctico con etanol (Troupe R., Dimilla E.), empleando como catalizador ácido sulfúrico originando ciertos problemas al emplear ese catalizador a grandes dosis, una de ellas es la degradación del ácido láctico, pero al pasar los años empezaron a surgir diferentes investigaciones, orientadas al empleo de catalizadores heterogéneos.

En el año de 2003 al 2006 se realizó un proyecto llamado *Reactive Distillation for Esterification of Bio-based Organic Acids*. En donde se abordó en especial el tema de la producción del lactato de etilo y para ello se investigó la formación y distribución de los oligómeros de ácido láctico en diferentes concentraciones (Vu D. T. et al. 2005), también se investigó el modelo cinético para las reacciones de esterificación implicadas. (Asthana N.S., et al. 2006) y por último se llevó a cabo el proceso de producción del lactato de etilo empleando una columna de destilación reactiva (Gao J., et al. 2007).

A partir de estos trabajos empezaron a surgir nuevas investigaciones: Pereira S., et al. (2008), estudiaron el equilibrio termodinámico y la cinética de la reacción de

esterificación del ácido láctico con el etanol empleando como catalizador una resina de intercambio iónico, en este caso, Amberlyst 15. Los autores obtienen diferentes conclusiones, una de ellas es el empleo de una relación molar de 3:1 (etanol - ácido láctico), pues disminuye la formación de los oligómeros a tal punto que se pueden despreciar.

Como se ha manifestado en este trabajo, muchos investigadores han reportado la producción del lactato de etilo sin contemplar los oligómeros (Arroyave J. et al. 2015) (Avenado J. et al. 2018) (Castrillon N. et al. 2020) (Ricardo A. et al. 2020) al operar en las condiciones sugeridas por Pereira. Algunos otros han optado por utilizar un reactor y otros han intensificado el proceso mediante el uso de una columna de destilación reactiva (Gao J., et al. 2007).

Igual existen diversos trabajos relacionados con el catalizador, utilizando diferente materia prima y haciéndolo en forma experimental. En este último caso un trabajo experimental de tesis llamado *Estudio experimental de la síntesis de lactato de etilo en una columna de destilación reactiva* por Oaxaca M. (2018), utilizó una columna de destilación reactiva para la producción de lactato de etilo con 3 diversas condiciones experimentos, en el cual el primero, se empleó menor cantidad de energía en el rehervido por lo que no se obtuvieron las condiciones de temperatura en la zona reactiva (80 °C – 90 °C), en la segunda condición se suministró energía para mantener la temperatura en la zona reactiva entre 80 a 90 grados °C, pero, modificando el tiempo de operación a 2.8 horas por lo que hubo una mejora en la composición del lactato de etilo. Por último, se aumentó el tiempo y se obtuvo en los fondos una composición del 80% molar de lactato de etilo sin considerar la presencia de los oligómeros, aunque sí se formaron. (Oaxaca M. 2018).

CAPITULO 3. METODOLOGÍA

En este capítulo se muestran las actividades desarrolladas para el cumplimiento de los objetivos planteados anteriormente y las consideraciones que se tomaron en cuenta.

3.1. ACTIVIDADES PREPARATORIAS

Se realizó un trabajo referente a los oligómeros de AL y a la formación de oligómeros de LE para la incorporación de estas moléculas a las simulaciones en la columna de destilación reactiva. Como primer paso se investigó las estructuras de los oligómeros ya que para estimar las propiedades en Aspen Plus V11 se requiere la estructura de la molécula. En la literatura si se encontró algunas estructuras de los oligómeros de AL, pero no los oligómeros de LE, por ende, se empleó un mecanismo de reacción tipo condensación para formar las estructuras de los oligómeros de LE. Las propiedades se calcularon mediante el módulo NIST TDE. (véase anexo 1).

Posteriormente se hizo una investigación sobre el proceso de esterificación para la producción del LE, junto a su cinética química y aspectos generales de la destilación reactiva. Además, se conocieron las herramientas del software Aspen Plus para realizar las simulaciones pertinentes en columnas de destilación reactiva. También se revisó la incorporación de moléculas al software aspen plus.

3.2. SIMULACIÓN

Como primera etapa se eligió el modelo termodinámico en base al Algoritmo de Eric Carlson (véase anexo 2) y en base al asistente de Aspen. El modelo termodinámico elegido es UNIFAC. Posteriormente se añadieron las moléculas implicadas en la producción del lactato de etilo los cuales son ácido láctico, etanol, lactato de etilo y agua para la primera simulación. Para la segunda simulación, se agregaron 2 compuestos más, el oligómero AL2 y el L2E, en la última simulación, se adjuntó el oligómero AL3 y el L3E más los compuestos de la segunda simulación.

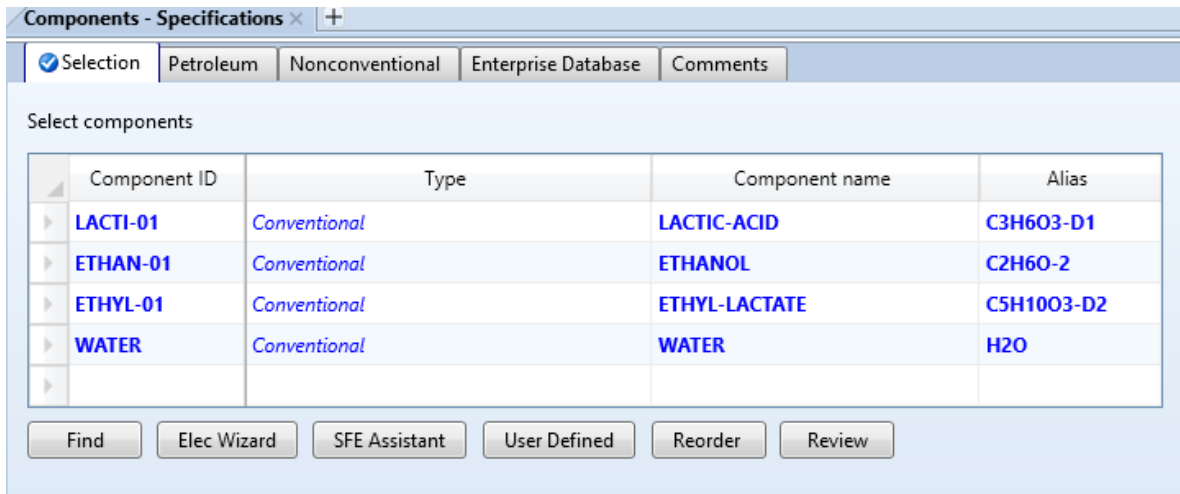


Figura 3.1 Lista de componentes para simulación 1 en Aspen Plus

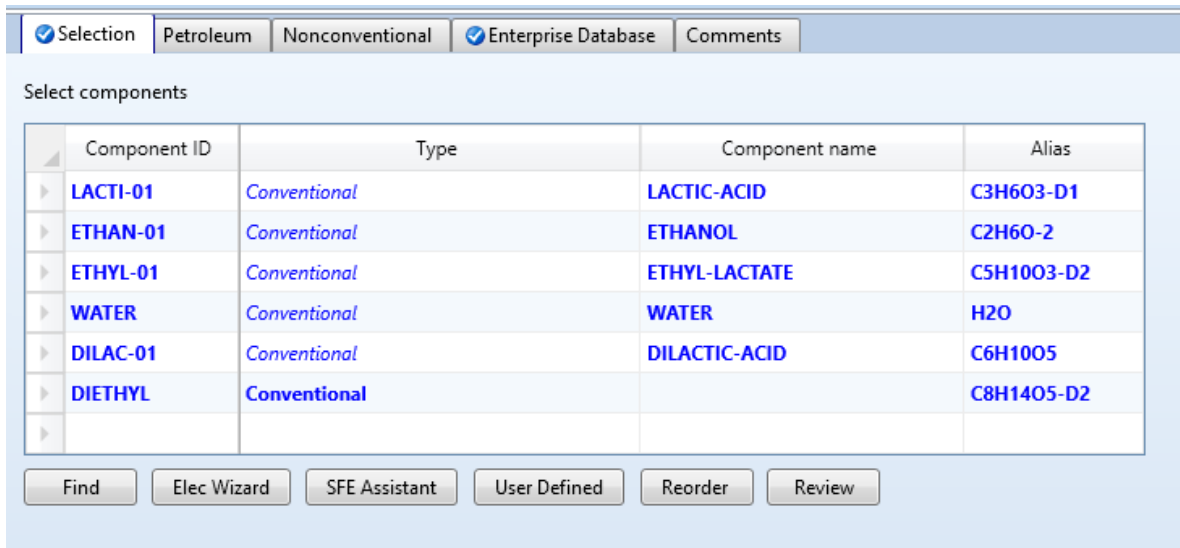


Figura 3.2 Lista de componentes para simulación 2 en Aspen Plus.

Component ID	Type	Component name	Alias
LACTI-01	Conventional	LACTIC-ACID	C3H6O3-D1
ETHAN-01	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
ETHYL-01	Conventional	ETHYL-LACTATE	C5H10O3-D2
WATER	Conventional	WATER	H2O
DILAC-01	Conventional	DILACTIC-ACID	C6H10O5
DIETHYL	Conventional		C8H14O5-D2

Figura 3.3 Lista de componentes para simulación 2 en Aspen Plus.

En la segunda etapa se especificaron las alimentaciones, como se pueden observar en la Figura 3.4 y Figura 3.5, parámetros de la columna de destilación reactiva y la cinética química junto con las reacciones.

Component	Value
LACTI-01	0.6
ETHAN-01	
ETHYL-01	
WATER	0.4
DILAC-01	
DIETHYL	
TRILA-01	
TRIETHYL	
Total	1

Figura 3.4. Especificaciones de la corriente de alimentación de AL 88 % w/w.

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables:

- Temperature: 293.15 K
- Pressure: 1.06 atm
- Vapor fraction: []
- Total flow basis: Mole
- Total flow rate: 60 kmol/hr
- Solvent: []

Reference Temperature:

- Volume flow reference temperature: [] C
- Component concentration reference temperature: [] C

Composition: Mole-Frac

Component	Value
LACTI-01	
ETHAN-01	0.98
ETHYL-01	
WATER	0.02
DILAC-01	
DIETHYL	
TRILA-01	
TRIETHYL	
Total	1

Figura 3.5. Especificaciones de la corriente de alimentación de etanol 99 % w/w.

Tanto la corriente de AL y de Etanol estarán a una temperatura de 20°C y una presión muy cercana a 1 atm. La relación de alimentaciones se estableció 2:1 molar de etanol y ácido láctico respectivamente.

En cuanto a los valores de los flujos se determinó a partir de las cantidades importadas de tolueno y benceno reportadas por el sistema de información energética de la SENER, en donde para el año 2019 se reportaron un poco más de 20 mil toneladas de tolueno y de benceno 1.7 toneladas aproximadamente (ANIQ), por lo cual se producirán aproximadamente 20 mil toneladas de lactato de etilo.

Para la simulación de la CDR se utilizó la columna RADFRAC del simulador Aspen Plus, el cual utiliza un método que permite resolver las ecuaciones de materia y energía de toda la columna.

En los parámetros del número de etapas y la relación de reflujo de la CDR previamente se tuvo que realizar métodos cortos (véase anexo 3) con el fin de iniciar la simulación, estos parámetros se ajustaron con base a varias simulaciones posteriores.

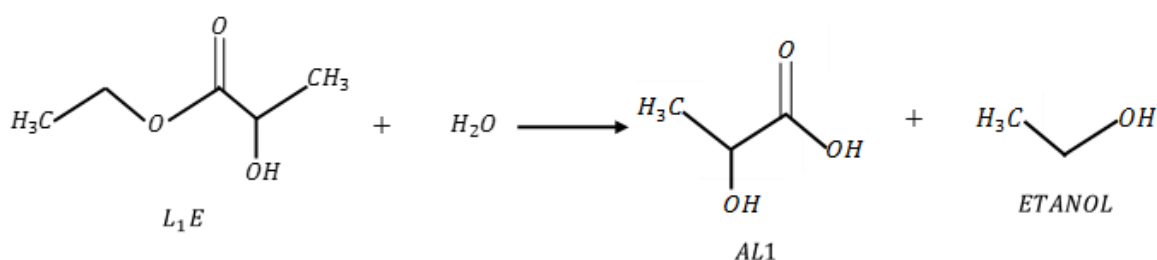
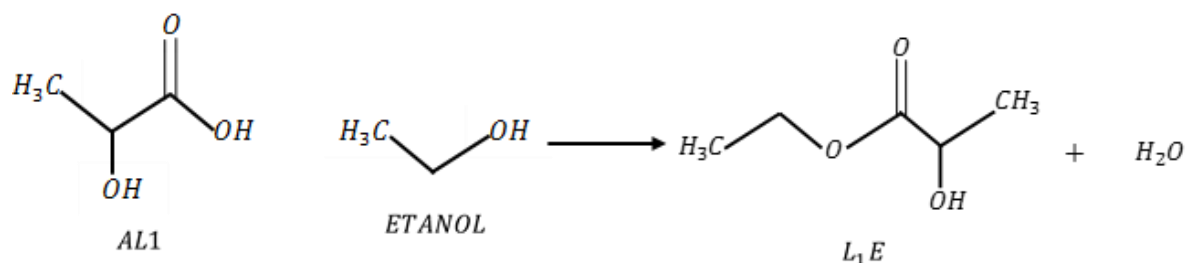
En los parámetros hidráulicos de la CDR (véase anexo 4), para el diámetro de la columna se empleó primero el método de Brown-Souder (véase anexo 4.1)

utilizando un espaciado entre etapas de 24 in de acuerdo con las reglas heurísticas (Turton, et al. 2009). Posteriormente el diámetro se ajustó mediante simulaciones en Aspen. En el caso del volumen de la retención del líquido y la caída de presión, se emplearon correlaciones de Benítez y de Treybal descritos por (Pérez A. et al.,2019) (véase anexo 3.2). En cuestión al empaque se utilizó Mellapakpl que esta incorporado en el software Aspen plus. En la Tabla 3.1 se muestra un resumen de los datos obtenidos;

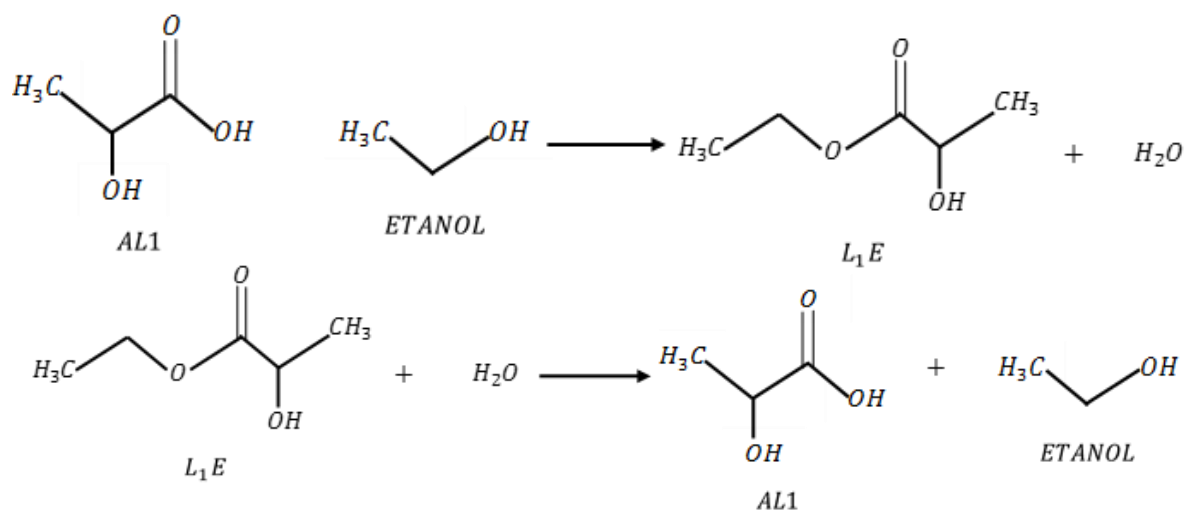
Tabla 3.1. *Valores obtenidos*

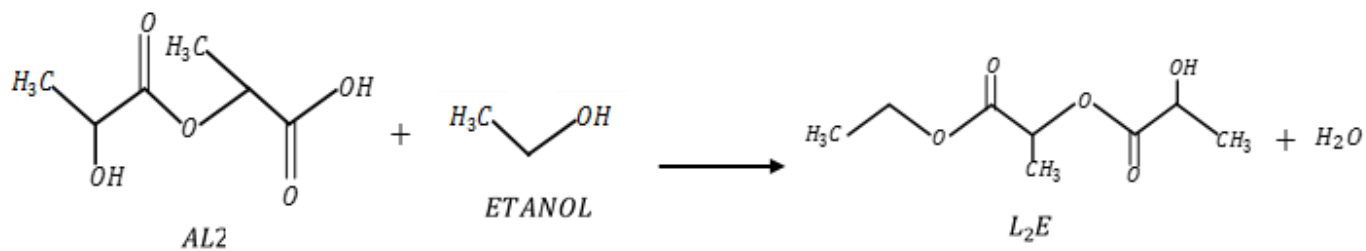
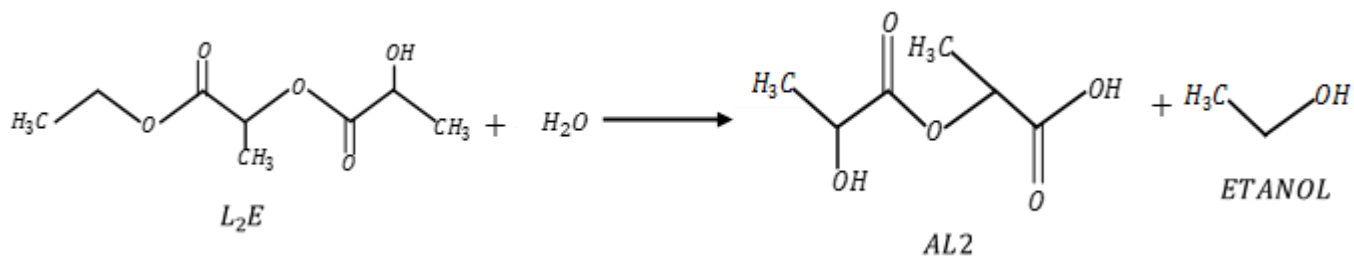
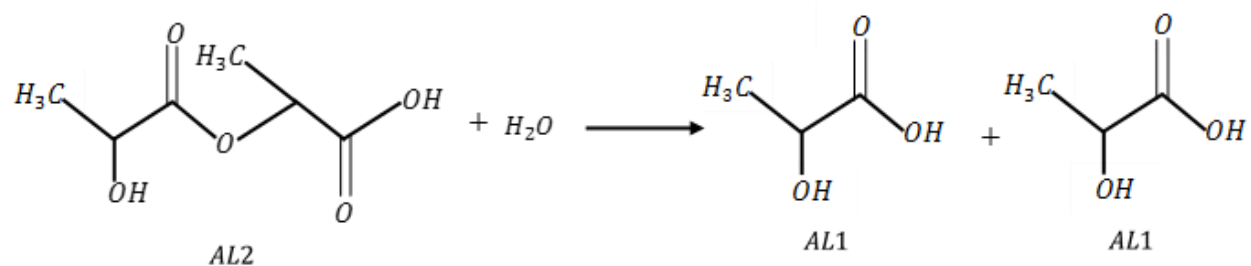
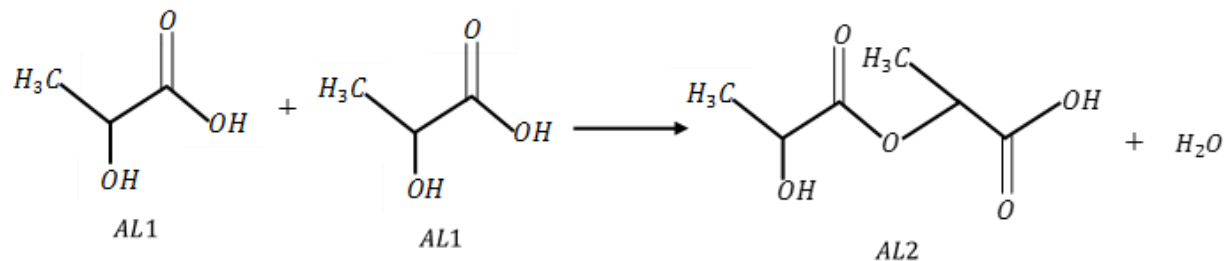
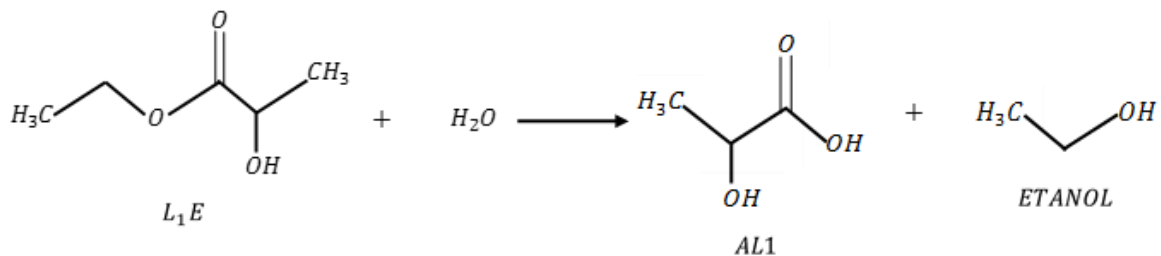
SIMBOLO	PARAMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
dp	Diámetro efectivo de partícula	0.0023	m
Kp	El factor de pared	0.9696	-
ReG	Numero de Reynolds de la fase gaseosa	21583.0048	-
ψo	Coefficiente de resistencia del empaque seco	0.3016	-
ΔPo/Z	Caída de presión del gas seco	274.4529	Pa/m
VL	Velocidad del liquido	0.0073	m/s
ReL	Numero de Reynolds de la fase liquida	87.2072	-
FrL	El número del liquido	0.00077	-
ah/a	Coefficiente especifico	0.7452	-
hL	Acumulación del líquido (fracción)	0.0390	-
ΔP/Z	Caída de presión total	452.2203	Pa/m
ΔP (por etapa de 24 in)	Caída de presión por etapa con espaciado de 24 in	275.6735	Pa

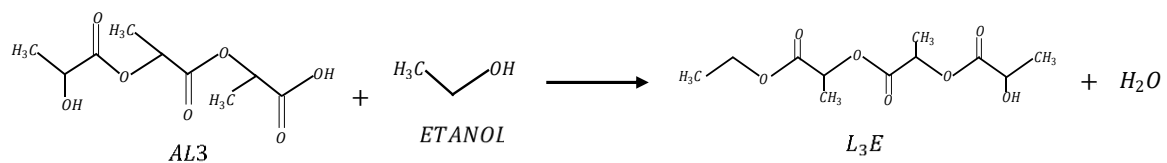
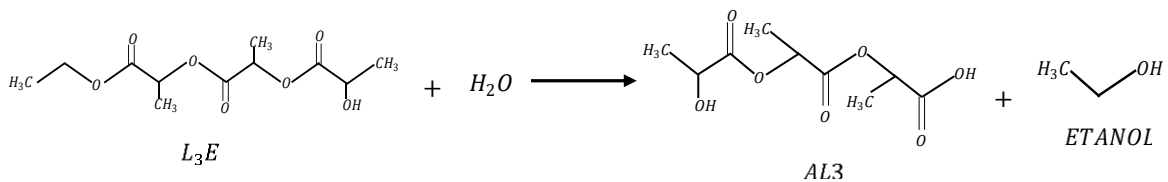
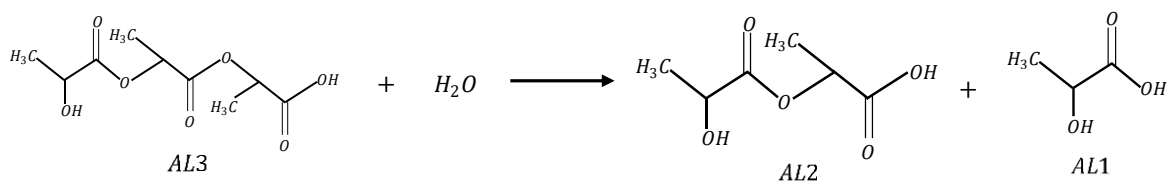
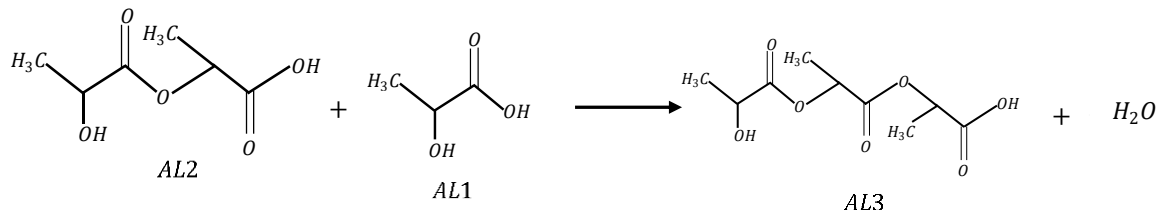
En relación con la cinética de las reacciones implicadas se tomaron las constantes cinéticas de acuerdo con el trabajo de (Fields N. et al., 2007) explicado anteriormente, por lo tanto, para la simulación sin oligómeros se plantearon una reacción reversible, para la simulación con 1 oligómero se tomaron en cuenta 3 reacciones reversibles y para la simulación con 2 oligómeros 5 reacciones reversibles.



R- 3.1. Reacciones implicadas para la primera simulación.







R- 3.3. Reacciones implicadas para la segunda simulación.

Por último, se analizó de forma comparativa las 3 simulaciones en base a los gráficos y tablas arrojadas por el simulador.

CAPITULO 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se dan a conocer tablas y gráficos obtenidos de cada simulación y posteriormente se compararán los resultados.

En la Tabla 4.1 se dan a conocer los parámetros calculados para las simulaciones.

Tabla 4.1 *Parámetros empleados en las simulaciones*

PARAMETROS	VALORES								
NUMERO DE ETAPAS	16								
HETP (in)	24								
ETAPAS CATALITICAS	6								
ETAPAS NO CATALITICAS	10								
ETAPA ALIMENTACIÓN ETANOL	12								
ETAPA ALIMENTACIÓN AL	5 <tr><td>CAÍDA DE PRESIÓN POR ETAPA (Pa)</td><td>275.674</td></tr> <tr><td>FRACCIÓN hL</td><td>0.0390</td></tr> <tr><td>RELACIÓN DE REFLUJO</td><td>0.1</td></tr> <tr><td>DIAMETRO DE LA COLUMNA (m)</td><td>0.9</td></tr>	CAÍDA DE PRESIÓN POR ETAPA (Pa)	275.674	FRACCIÓN hL	0.0390	RELACIÓN DE REFLUJO	0.1	DIAMETRO DE LA COLUMNA (m)	0.9
CAÍDA DE PRESIÓN POR ETAPA (Pa)	275.674								
FRACCIÓN hL	0.0390								
RELACIÓN DE REFLUJO	0.1								
DIAMETRO DE LA COLUMNA (m)	0.9								

En la siguiente figura se muestran las zonas de rectificación, reactiva y de agotamiento:

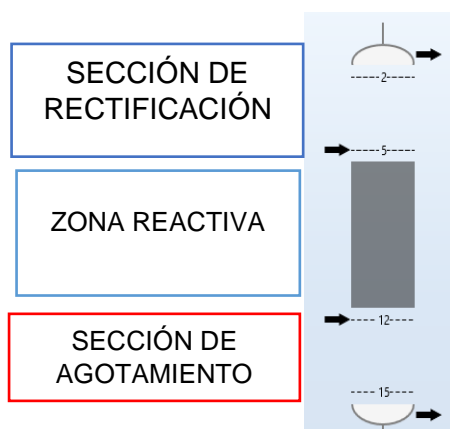


Figura 4.1 *Secciones de la columna de destilación reactiva.*

4.1. SIMULACIÓN 1 (SIN OLIGÓMEROS)

Considerando la información de la tabla 4.1 fue posible generar el siguiente esquema, donde se muestra las condiciones y composiciones de las dos alimentaciones a la CDR, la corriente del destilado y la corriente de los fondos.

En cuestión a la alimentación, se empleó un 60% mol (88% w) de ácido láctico con un 40% mol (12% w) de agua debido a que en ese porcentaje se encuentran las presentaciones en el mercado de ácido láctico.

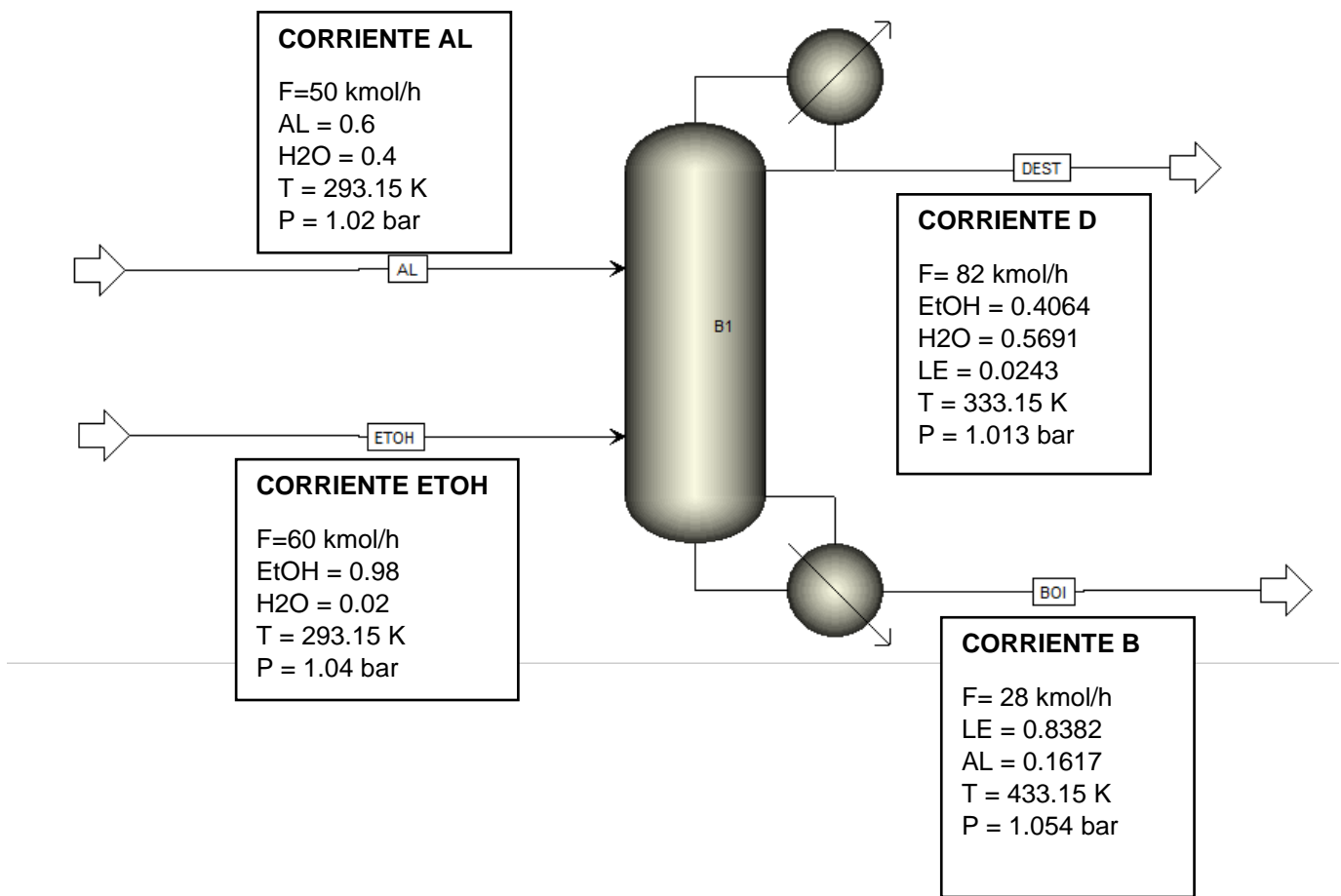


Figura 4.2 Diagrama de composiciones y condiciones de las corrientes de la CDR. (simulación 1).

En la Tabla 4.2, se dan a conocer el perfil de temperaturas, de composiciones, y los flujos de vapor y líquido.

Tabla 4.2 *Perfiles TPF (simulación 1)*

ETAPA	T (°C)	P (bar)	HEAT DUTY (cal/s)	FLUJO L (Kmol/h)	FLUJO V (Kmol/h)	FLUJO A
1	81.34	1.013	-246607	90.2	0	0
2	90.44	1.016	0	8.00	90.2	0
3	94.18	1.018	0	7.54	90.00	0
4	97.22	1.021	0	5.81	89.54	0
5	110.03	1.024	0	75.18	87.81	50
6	120.51	1.027	0	78.17	107.18	0
7	129.24	1.029	0	82.62	110.17	0
8	133.10	1.032	0	87.27	114.62	0
9	134.18	1.035	0	91.24	119.27	0
10	134.30	1.038	0	94.54	123.24	0
11	134.23	1.040	0	97.12	126.54	0
12	134.47	1.043	0	157.66	129.12	60
13	152.68	1.046	0	168.93	129.66	0
14	156.12	1.049	0	171.13	140.93	0
15	157.12	1.051	0	168.11	143.13	0
16	160.95	1.054	415944	28	140.11	0

En la Tabla 4.3 se muestran las composiciones en fase líquida a lo largo de la CDR.

Tabla 4.3 Composición molar en fase líquida en la CDR. (simulación 1)

ETAPA	AL	EtOH	LE	AGUA
1	9,95E-08	0.4064	0.0244	0.5691
2	5.39E-05	0.1964	0.2177	0.5857
3	0.0019	0.1799	0.3358	0.4822
4	0.0499	0.1669	0.3595	0.4235
5	0.4067	0.1106	0.1791	0.3034
6	0.3345	0.0910	0.4063	0.1680
7	0.2665	0.0799	0.5687	0.0847
8	0.1966	0.0767	0.6772	0.0493
9	0.1359	0.0795	0.7533	0.0311
10	0.0866	0.0843	0.8099	0.0190
11	0.0484	0.0891	0.8523	0.0100
12	0.0314	0.0926	0.8726	0.0032
13	0.0301	0.0131	0.9561	4.84E-04
14	0.0316	0.0017	0.9665	6.45E-05
15	0.0466	2.19E-04	0.9531	8.45E-06
16	0.1617	2.57E-05	0.8382	1.07E-06

4.2. SIMULACIÓN 2 (1 OLIGÓMERO)

En el siguiente esquema se muestra las condiciones y composiciones de las dos alimentaciones a la CDR, la corriente del destilado y la corriente de los fondos, esta simulación no se ha llevado a cabo con frecuencia pues hay pocos trabajos que agregan los oligómeros, así que la principal justificación de este análisis y de este trabajo es realizar la comparativa sobre los efectos de agregar los oligómeros.

En el caso de la alimentación, será la misma entre las simulaciones, debido a que se requiere ver que tanto afecta considerar los oligómeros en este proceso de producción del lactato de etilo.

Los oligómeros se producen adentro de la columna y no se consideran oligómeros en las alimentaciones debido a que las alimentaciones se manejarán con una temperatura ambiente.

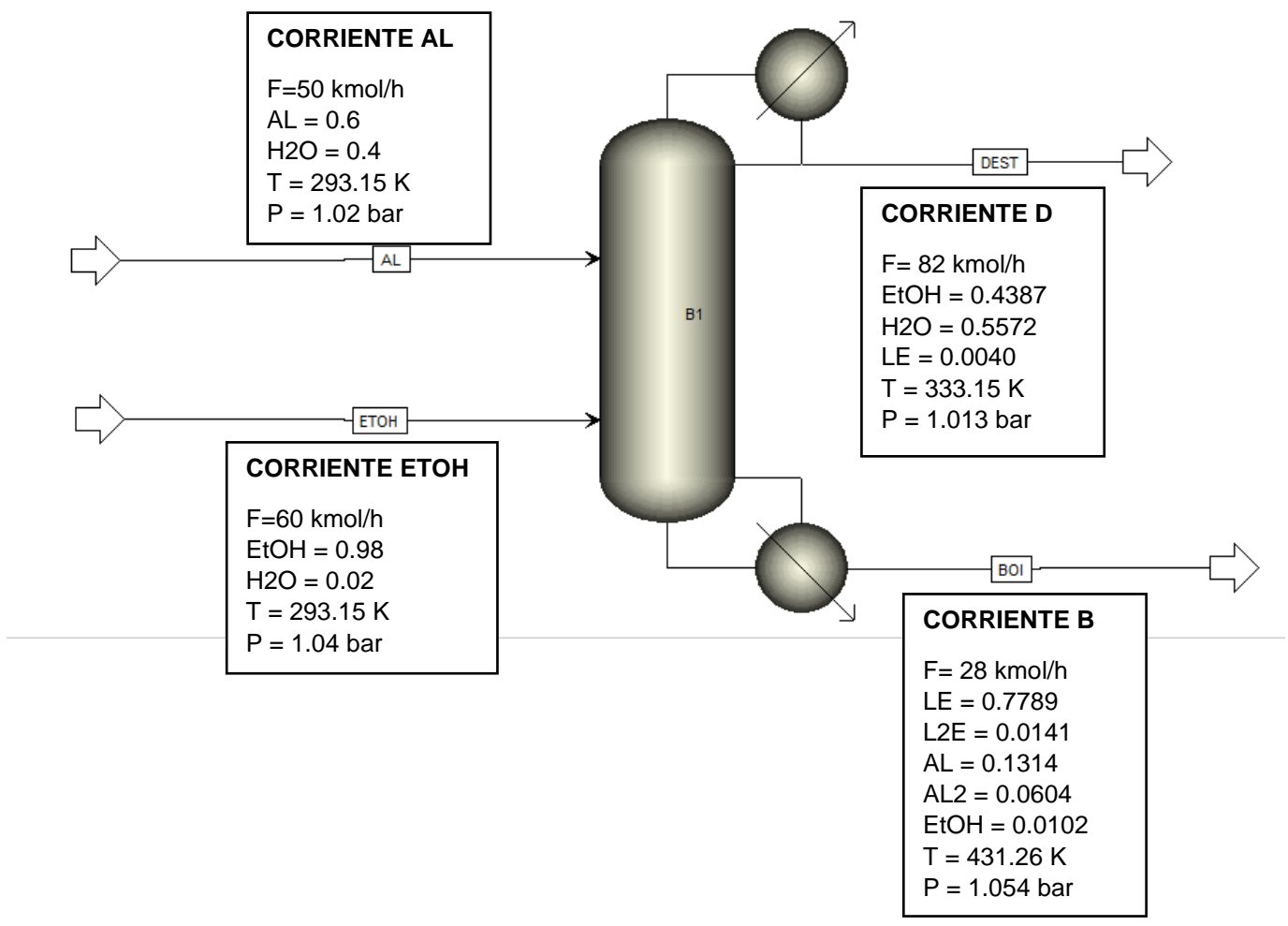


Figura 4.3 Diagrama de composiciones y condiciones de las corrientes de la CDR. (simulación 2).

En la Tabla 4.4, se muestran los valores del perfil de temperaturas, de composiciones, y los flujos de vapor y líquido en cada etapa.

Tabla 4.4 Perfiles TPF simulación 2.

ETAPA	T (°C)	P (bar)	HEAT DUTY (cal/s)	FLUJO L (Kmol/h)	FLUJO V (Kmol/h)	FLUJO A
1	80.47	1.013	-244442	90.2	0	0
2	86.42	1.016	0	8.47	90.2	0
3	87.57	1.018	0	8.40	90.47	0
4	88.21	1.021	0	6.84	90.40	0
5	100.75	1.024	0	78.34	88.84	50
6	97.17	1.027	0	85.66	110.34	0
7	94.04	1.029	0	89.41	117.66	0
8	91.85	1.032	0	92.50	121.41	0
9	90.25	1.035	0	95.38	124.50	0
10	88.99	1.038	0	98.28	127.38	0
11	87.60	1.040	0	101.93	130.28	0
12	83.57	1.043	0	172.154	133.92	60
13	85.25	1.046	0	167.78	144.15	0
14	98.28	1.049	0	153.65	139.78	0
15	132.86	1.051	0	151.95	125.65	0
16	158.11	1.054	413592	28	123.95	0

En la Tabla 4.5 se muestran las composiciones en fase líquida a lo largo de la CDR.

Tabla 4.5 Composición molar en fase líquida en la CDR. (simulación 2)

ETAPA	AL	EtOH	LE	AGUA	AL2	L2E
1	2.67E-08	0.4387	0.0040	0.5572	3.01E-10	2.28E-13
2	1.30E-05	0.1168	0.0145	0.8686	4.32E-08	6.87E-11
3	0.0005	0.0947	0.0145	0.8901	4.78E-07	1.56E-09
4	0.0216	0.1106	0.0192	0.8484	6.83E-06	4.45E-08
5	0.3839	0.1344	0.0259	0.4556	7.03E-05	1.00E-06
6	0.2184	0.1667	0.1384	0.4657	0.0102	0.0002
7	0.1500	0.2393	0.1810	0.4138	0.0149	0.0007
8	0.1075	0.3136	0.2059	0.3544	0.0169	0.0014
9	0.0774	0.3860	0.2223	0.2943	0.0176	0.0022
10	0.0546	0.4568	0.2318	0.2360	0.0175	0.0030
11	0.0361	0.5333	0.2267	0.1832	0.0166	0.0038
12	0.0214	0.6825	0.1383	0.1455	0.0098	0.0022
13	0.0220	0.6144	0.1845	1.67E-01	0.0101	0.0023
14	0.0251	0.3563	0.4778	1.26E-01	0.0116	0.0026
15	0.0379	8.03E-02	0.8275	3.32E-02	0.0177	0.0032
16	0.1314	1.02E-02	0.7789	4.82E-03	0.0604	0.0141

4.3. SIMULACIÓN 3 (2 OLIGÓMEROS)

En el siguiente esquema se muestra las condiciones y composiciones de las dos alimentaciones a la CDR, la corriente del destilado y la corriente de los fondos:

En las alimentaciones no se agregan los oligómeros del ácido láctico ya que todavía no se han formado debido a que la temperatura que se esta manejando en esas corrientes es ambiente y esto hace que no exista energía suficiente para propiciar las reacciones de formación de los oligómeros ya que estas reacciones son endotérmicas.

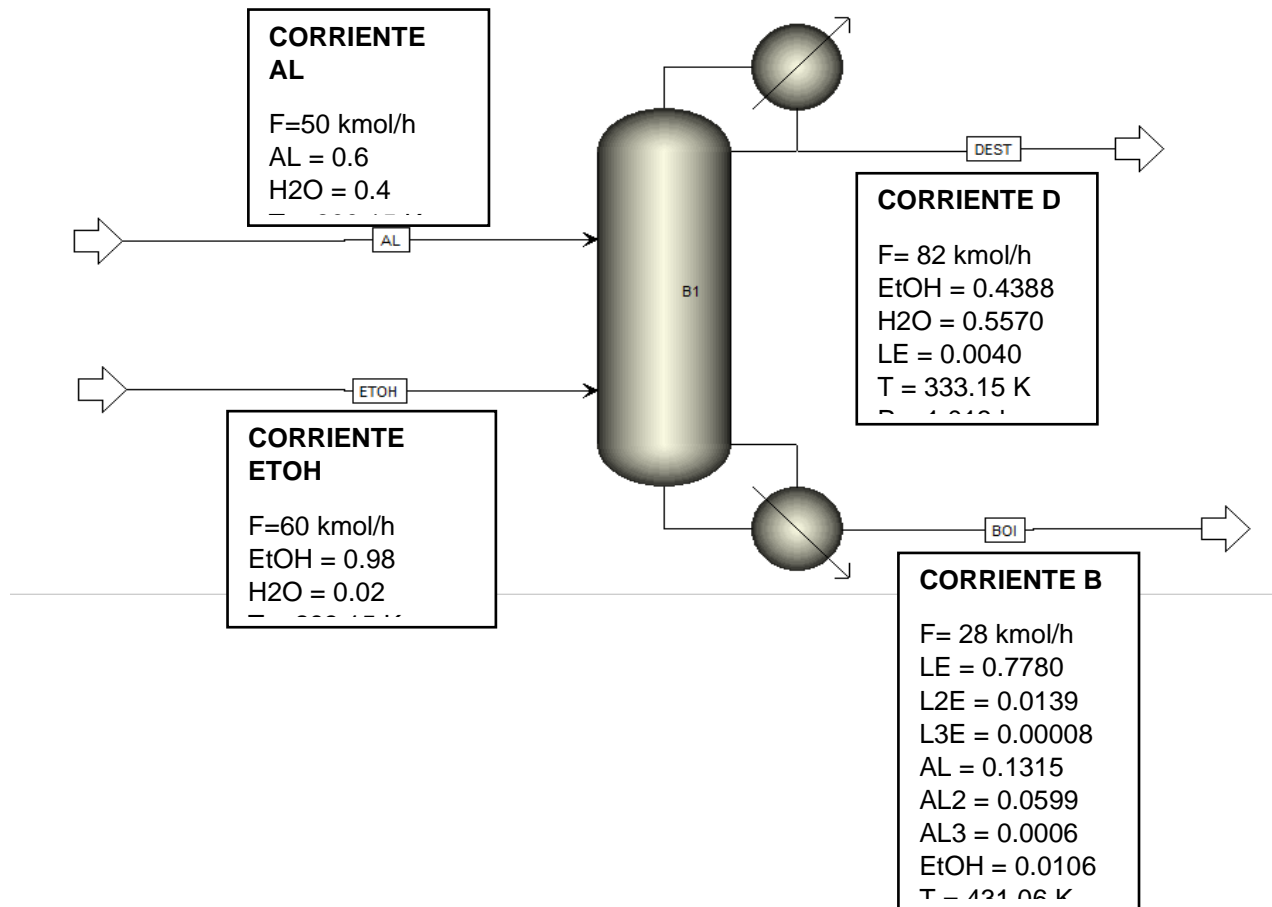


Figura 4.4 Diagrama de composiciones y condiciones de las corrientes de la CDR. (simulación 3).

En la Tabla 4.6, se dan a conocer el perfil de temperaturas, de composiciones, y los flujos de vapor y líquido.

Tabla 4.6 Perfiles TPF simulación 3.

ETAPA	T (°C)	P (bar)	HEAT DUTY (cal/s)	FLUJO L (Kmol/h)	FLUJO V (Kmol/h)	FLUJO A
1	80.4742	1.01325	-244433	90.2	0	0
2	86.4215	1.01601	0	8.4715	90.2	0
3	87.5652	1.01876	0	8.40191	90.4715	0
4	88.2141	1.02152	0	6.84282	90.4019	0
5	100.746	1.02428	0	78.3454	88.8428	50
6	97.1502	1.02703	0	85.7249	110.345	0
7	94.0255	1.02979	0	89.5083	117.725	0
8	91.8316	1.03255	0	92.607	121.508	0
9	90.2338	1.0353	0	95.4925	124.607	0
10	88.9781	1.03806	0	98.3892	127.492	0
11	87.5858	1.04082	0	102.028	130.389	0
12	83.5581	1.04357	0	172.273	134.028	60
13	85.1537	1.04633	0	168.069	144.273	0
14	97.6901	1.04909	0	154.058	140.069	0
15	132.086	1.05184	0	151.728	126.058	0
16	157.916	1.0546	413797	28	123.728	0

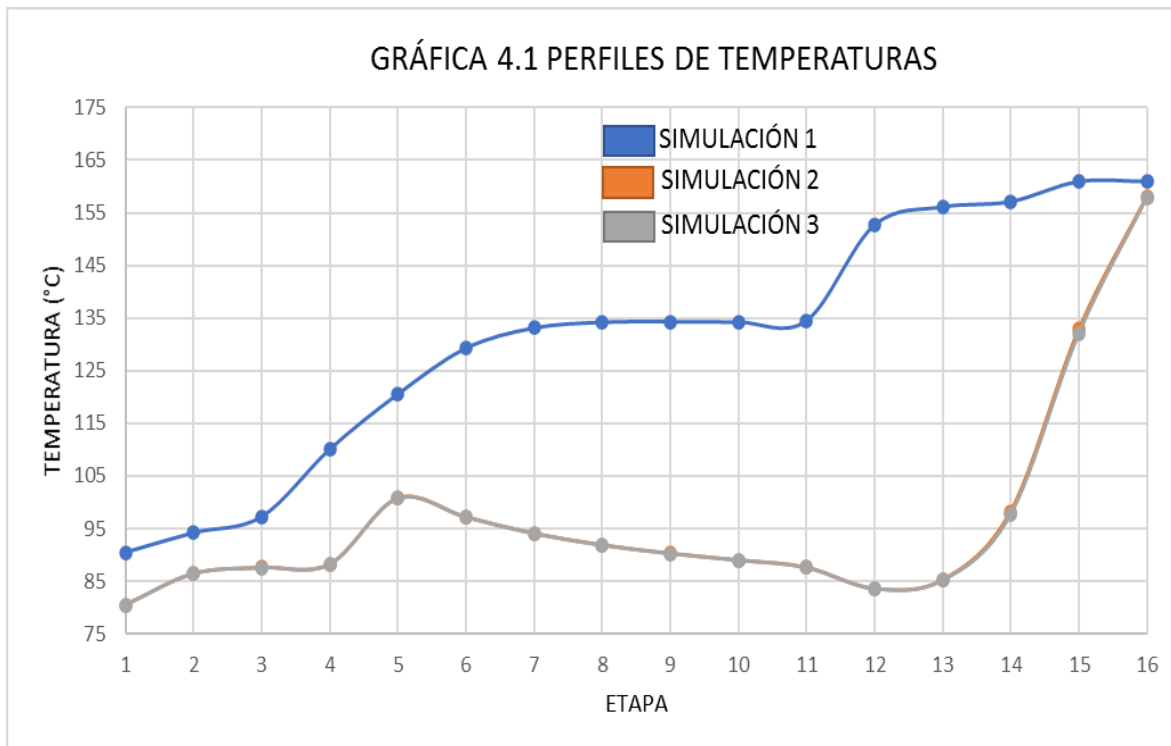
En la Tabla 4.7 se muestran las composiciones en fase líquida a lo largo de la CDR.

Tabla 4.7 Composición molar en fase líquida en la CDR. (simulación 3)

ETAPA	AL	EtOH	LE	AGUA	AL2	L2E	AL3	L3E
1	2.67E-08	0.4388	0.0040	0.5570	2.98E-10	2.25E-13	1.09E-35	2.80E-24
2	1.30E-05	0.1169	0.0145	0.8685	4.27E-08	6.80E-11	3.27E-29	5.33E-20
3	0.0005	0.0948	0.0145	0.8901	4.73E-07	1.55E-09	1.87E-33	2.90E-17
4	0.0216	0.1107	0.0191	0.8484	6.76E-06	4.41E-08	4.80E-16	4.64E-14
5	0.3839	0.1345	0.0258	0.4556	6.96E-05	9.92E-07	4.56E-11	6.53E-11
6	0.2181	0.1668	0.1383	0.4659	0.0101	0.0002	6.65E-05	1.40E-06
7	0.1498	0.2395	0.1807	0.4142	0.0147	0.0007	0.0001	4.20E-06
8	0.1074	0.3137	0.2055	0.3548	0.0168	0.0014	0.0001	8.16E-06
9	0.0773	0.3861	0.2218	0.2948	0.0175	0.0021	0.0001	1.30E-05
10	0.0546	0.4569	0.2312	0.2365	0.0173	0.0030	0.0001	1.85E-05
11	0.0361	0.5334	0.2262	0.1837	0.0164	0.0038	0.0001	2.41E-05
12	0.0214	0.6826	0.1378	0.1459	0.0097	0.0022	9.99E-05	1.43E-05
13	0.0219	0.6164	0.1816	1.67E-01	0.0100	0.0023	0.0001	1.46E-05
14	0.0250	0.3640	0.4670	1.30E-01	0.0114	0.0025	0.0001	1.60E-05
15	0.0379	8.36E-02	0.8228	3.48E-02	0.0175	0.0032	0.0001	1.64E-05
16	0.1315	1.07E-02	0.7780	5.08E-03	0.0599	0.0139	0.0006	8.77E-05

4.4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

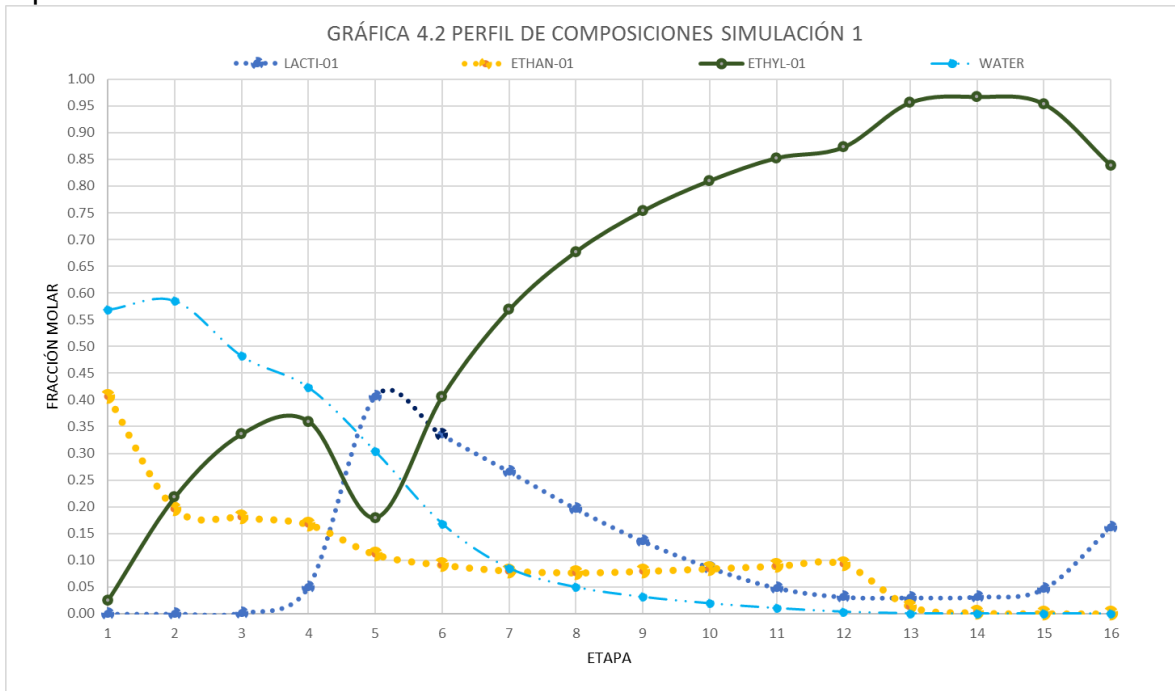
En la Gráfica 4.1, se muestran los perfiles de temperatura de las 3 simulaciones, en donde se observa que en la simulación sin oligómeros difiere el perfil de temperaturas de manera considerable a comparación de las otras dos simulaciones, siendo la primera con temperaturas más altas, esto debido a que las reacciones de formación de oligómeros y de polímeros de lactato de etilo son endotérmicas y por ende disminuyen la temperatura. Los perfiles de temperatura de las simulaciones 2 y 3, tienen la misma tendencia.



En la sección de agotamiento (etapas 16-13), en la simulación 1 se observa una disminución suave de la temperatura, y para las simulaciones 2 y 3 se muestra una disminución de temperatura más pronunciada debido a que al tener la energía suficiente en esas etapas se dan las reacciones de formación de los oligómeros de AL y a su vez de los polímeros del lactato de etilo y por ende disminuye la temperatura. Para las simulaciones 2 y 3 no se ve mucho el cambio ya que no hay una formación significativa del oligómero AL3 y LE3.

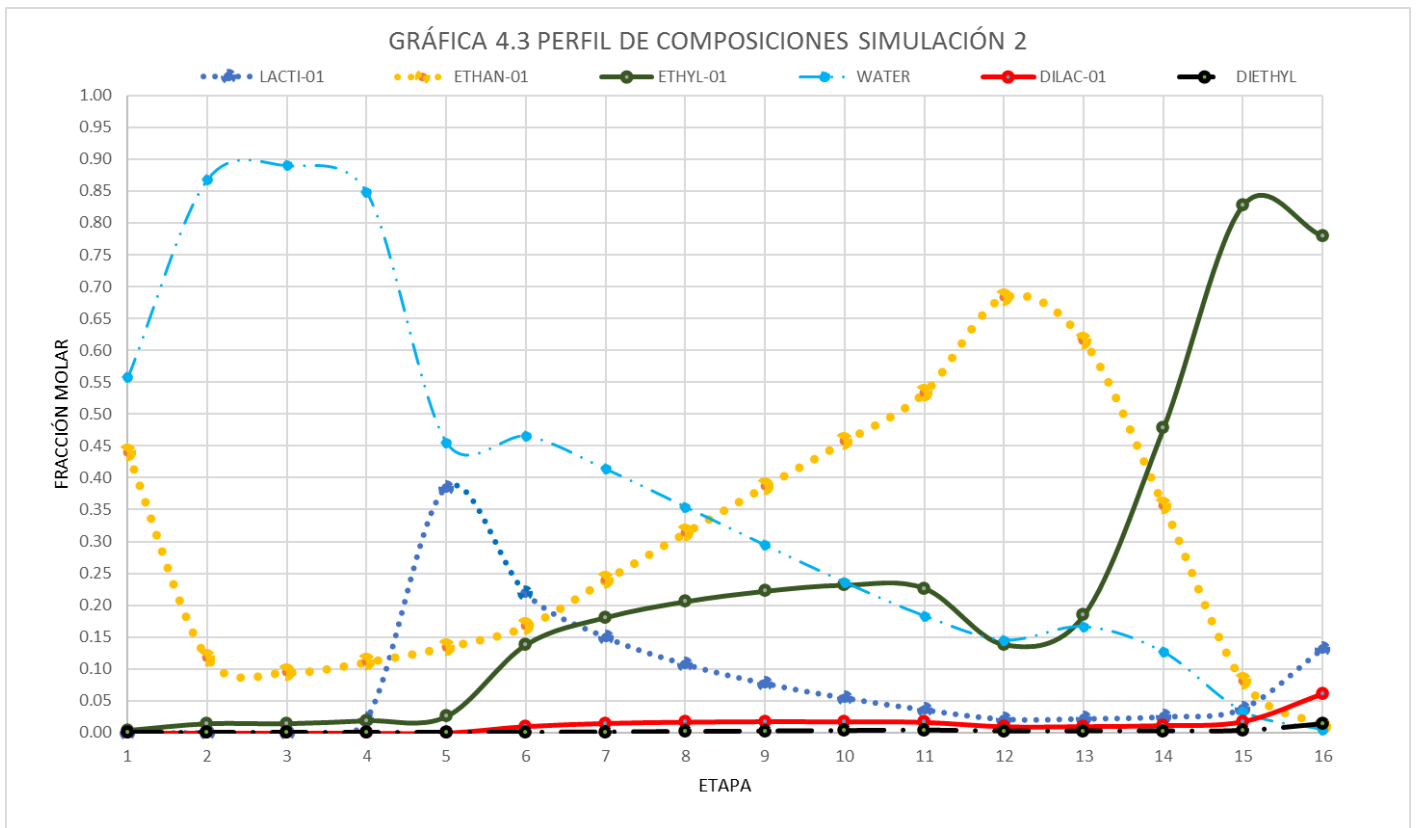
En la parte del balance de materia, (ver figura 4.2, 4.3 y 4.4), se muestran las composiciones del destilado y de los fondos para las 3 simulaciones, obteniendo un porcentaje del 83.82% molar del lactato de etilo en la parte de los fondos para la primera simulación, para la segunda simulación se obtuvo un 77.89% molar y para la tercera simulación 77.80% molar. En donde existe una diferencia considerable entre la simulación 1 y la simulación 2 y 3.

A continuación, se dan en forma de grafica los perfiles de composiciones en la fase liquida de las 3 simulaciones:

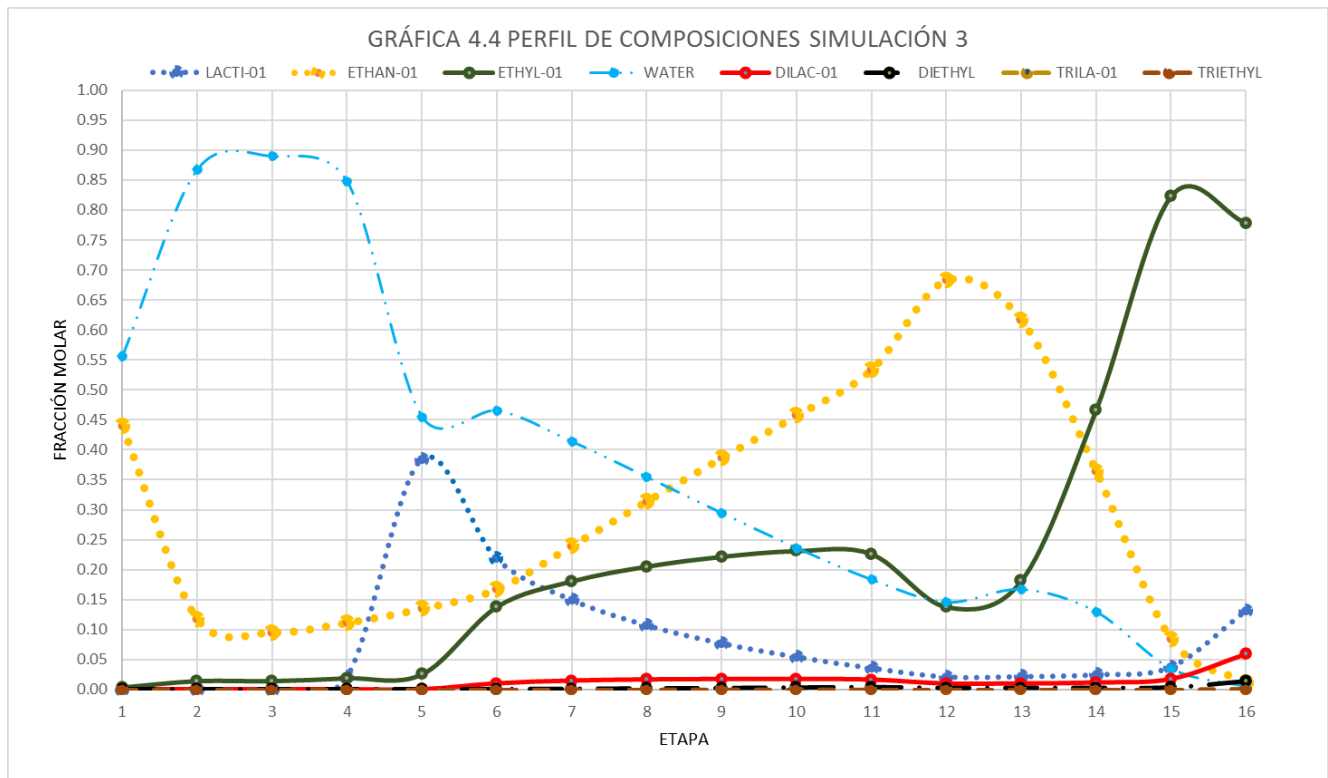


En las etapas del 6 al 11, se observa un incremento en la composición del LE, porque se está produciendo debido a las reacciones. En la etapa 5 disminuye la composición de LE debido a que en esa etapa se alimenta AL por lo que se observa un fenómeno de mezclado y por ende aumenta la composición de AL. Este fenómeno asimismo pasa en la etapa 12 en donde se alimenta el etanol desencadenando un aumento en la composición de este alcohol y una disminución en la composición de AL. En la sección de rectificación (etapas 4-2) hay un aumento en la composición de los componentes más ligeros, en este caso el agua y el etanol,

y en la sección de agotamiento un aumento en la composición de los componentes más pesados (AL Y LE).



Como en la anterior gráfica, se observan 5 fenómenos, la sección de rectificación (2-4), 2 fenómenos de mezclado en las etapas de alimentación de ácido láctico y etanol, la zona reactiva (6-11) y la sección de agotamiento (13-15). En cuanto al oligómero AL2 permanece representado por una línea de color rojo, en donde se observa su formación en la zona reactiva, y la composición aumenta en la sección de agotamiento, debido a que el etanol en estado líquido pasa al estado gaseoso, por lo que la composición de etanol disminuye de la etapa 12 a la etapa 16. La línea punteada de color negro es el L2E el cual en la zona reactiva se produce poco.



En el perfil de composiciones de la simulación 3 se observa un comportamiento muy similar con el perfil de composiciones de la simulación 2, debido a la escasa producción del oligómero AL3 y el polímero L3E. Se puede observar en las 3 graficas que existe una pequeña cantidad de LE en la etapa de rectificación y esto no quiere decir que se esté produciendo en esa zona, sino que es arrastrado.

Por último, se planteó una recirculación del destilado hacia la corriente de alimentación del etanol, pero esto produce una disminución en la producción del lactato de etilo y un aumento en la producción del AL y sus respectivos oligómeros, también aumenta el tamaño del equipo debido al exceso del agua que se suministra en la alimentación por la corriente de etanol. Por esta razón, no se profundiza en los resultados con recirculación.

CONCLUSIONES

En la estimación de las propiedades de los oligómeros empleando AspenPlus V11 solo se pudieron obtener propiedades de 4 oligómeros de AL, debido a que se requiere más información de los demás oligómeros.

Los oligómeros sí afectan al proceso de producción del lactato de etilo, debido a que se observan cambios en el perfil de temperaturas, a su vez en las composiciones del destilado y de los fondos de la columna de destilación reactiva (CDR).

Para realizar la simulación del proceso de producción del lactato de etilo en una CDR, como mínimo se debe de incorporar el oligómero 1 del ácido láctico (AL2), debido a que no muestra una diferencia importante entre los resultados de la simulación 3, en donde se consideraron 2 oligómeros.

Con respecto a la presión se trabajó a presión atmosférica y se sugiere a que en futuros trabajos se estudie el comportamiento de la formación de los oligómeros en CDR's a diferentes presiones de operación.

Se sugiere establecer un estudio sistemático respecto a la recirculación. Pues el presente trabajo abordó un solo estudio que no arrojó resultados considerables.

REFERENCIAS

1. Alvarez S., Evelson P., Boveris A. (2008). *Etanol: El combustible del futuro*. Universidad Buenos Aires. <http://repositorioubas.sisbi.uba.ar>
2. Arroyave J., Correa L., Duque D. (2015). DISEÑO CONCEPTUAL. SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE LACTATO DE ETILO. [Proyecto de grado de ingeniería, Universidad EAFIT] repository.eafit.edu.co
3. Asthana N.S., Kolah A.K., Vu D.T., Lira C.T., Miller D.J. (2006). *A kinetic Model for the Esterification of Lactic Acid and Its Oligomers*. Ind. Eng. Chem. 45, 5251-5257. [Pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ie0513604](https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ie0513604)
4. Avedano J., Ferreri F. & Lanfrango F. (2018). PRODUCCIÓN DE LACTATO DE ETILO A PARTIR DE ÁCIDO LÁCTICO Y BIOETANOL. [Proyecto Final I.Q.] ria.utn.edu.ar/handle/20.500.12272/3860
5. Cadena Agroindustrial (2004). *ETANOL: Análisis de estudios de cadena*. IICA-MAGFOR-jiCA. [Renida.net.n:/renida/ijca/e14-j60-et.pdf](http://renida.net.n:/renida/ijca/e14-j60-et.pdf)
6. Carballo L.M. (1997). Unidades de Transformación Multifuncional. Un reto del futuro próximo en el desarrollo de la ingeniería química. *Revista Ingeniería e Investigación*. 36, 14-16.
7. Cardona C.A., López L.J., López F.E. (2004). SEPARACIÓN DE ÁCIDO LÁCTICO POR DESTILACIÓN REACTIVA. Universidad EAFIT. *Revista EAFIT*. Vol.40, numero 135 40-53. Publicaciones-eafit.edu.co
8. Castrillon M. N. J. (2020). DESIGN AND CONTROL INTEGRATION OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR ETHYL LACTATE PRODUCTION. [Tesis de Maestría. Universidad de Antioquia]
9. Fields N., Glass R., Miller D (2007). *Reactive Distillation for Esterification of Bio-based Organic Acids*. (Informe: DE-FG36-04G014249). osti.gov/servlets/purl/937553
10. Gao J., Zhao X.M., Zhou L.Y. y Huang Z.H. (2007). *Investigation of Ethyl Lactate reactive distillation process*. IChemE, vol. 85 (A4), pp. 525-529. Sciondirect.com/science/article/abs/pii/s02638762077

11. Luyben Yu. (2008). Reactive Distillation Design and Control. John Wiley&Sons. Inc, USA.
12. Meza A. A. M. (2009). Desarrollo de un software de simulación para la integración de conocimientos en ingeniería química basado en el proceso de destilación. [Tesis de Maestría. Universidad Central de Venezuela] 190.169.28.21
13. Muthia R., Aloijsius G., Jobson M., Kiss A. (2019). Effect of boiling point rankings and feed locations on the applicability of reactive distillation on the applicability of reactive distillation to quaternary systems. ELSEVIER. 145 pp. 184-193.
14. Oaxaca M. (2018). Estudio experimental de la síntesis de lactato de etilo en una columna de destilación reactiva [Tesis de Ingeniería. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. UNAM] repositorio.unam.mx
15. Pereira C.S., Pinho S.P., Silva V.M. y Rodrigues A.E. (2008). Thermodynamic equilibrium and reaction kinetics for the esterification of lactic acid with ethanol catalyzed by acid ion-exchange resin. Industrial & Engineering Chemistry Research, 47(5), 1453-1463.
16. Pérez A., Pérez E., Liaño N. (2019). Diseño de una columna empacada y una torre de bandejas perforadas para la absorción de etanol. 1. Diseño de la columna empacada. Mutis, 9(1), 50-64, doi:10.217.89/22561498.1431
17. Ramírez D.B. (2011). *Evaluación del Factor de Efectividad en el Proceso de Obtención del Lactato de Etilo catalizado con Amberlite IR120*. (Informe: 1097-09-R. FIQ). unac.edu.pe
18. Ricardo A., Arick C., Luis G. & Arturo J. (2020). Intensified synthesis for ethyl lactate production including economic, sustainability and inherent safety criterio. ELSEVIER. Process Intensification, Volume 154, 108041.
19. Sánchez F.J. y Rodríguez G. (1995). *Esterificación*. 30 años INGENIERÍA QUÍMICA. Universidad Nacional de Colombia. pp. 87-93. revistas.unal.edu.co/index.php/ingainv/article/view/20904
20. Serna C., Rodríguez S. (2005). *Producción Biotecnológica de ácido láctico: Estado del Arte*. Ciencia y Tecnología Alimentaria, vol. 5, núm. 1, pp. 54-65 redalyc.org/pdf/724/72450109.pdf

21. Tsatse A., Oudenhoven S.R.G., tenKate A.J.B. & Sorensen E. (2021). Optimal design and operation of reactive distillation systems based on a superstructure methodology. ELSEVIER. CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH AND DESIGN 170 (2021) 107-133. www.elsevier.com/locate/cherd
22. Vélez J.L., Montalvo M., Velarde G., Vélez P., Jara F., Paredes J. (2017). *Fisiología bioquímica y metabolismo del ácido láctico: revisión de la literatura*. Revista Metro Ciencia, 25(2), pp. 27-31. docs.bvsalud.org
23. Villavicencio M. (2018). DETERMINACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA DE EMPAQUES ESTRUCTURADOS CATALITICOS MEDIANTE EL MODELO DE CANAL. [Tesis de Maestría, Instituto Politécnico Nacional]. tesis.ipn.mx/handle/123456789/27172.
24. Vu D.T., Kolah A.K., Asthana N.S., Peereboan L., Lira C.T. y Miller D.J. (2005). *Oligomer distribution in concentrated lactic acid solutions*. ELSEVIER. Fluid Phase Equilibria 236, pp. 125-135. www.elsevier.com/locate/fluid

IV. ANEXOS

En esta sección se describirán los métodos e información que se utilizaron en los pasos de la metodología.

ANEXO 1: AÑADICIÓN DE LOS OLIGOMEROS AL SIMULADOR

Para agregar las moléculas al simulador aspen plus v11, como primer paso en la sección de **selection** darle clic en el botón **User Defined**, se nos desplegará una ventana la cual nos pedirá indicar el ID del componente y un alias y el tipo de molécula como se muestra en las siguientes figuras;

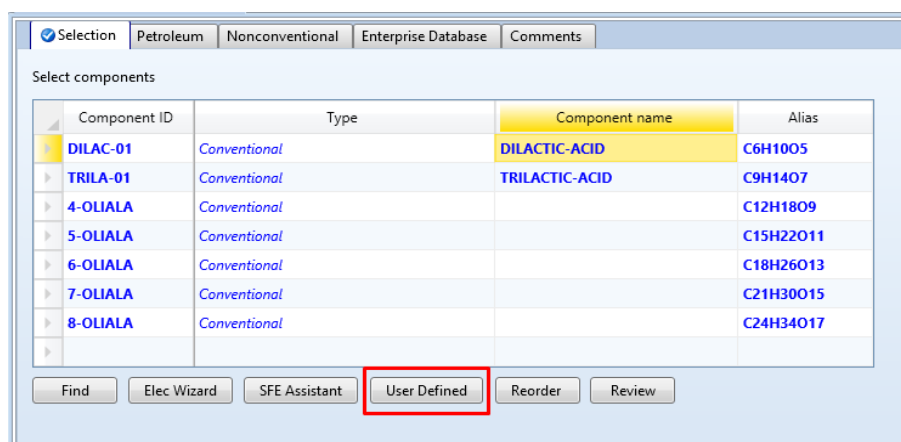


Figura IV.1 Ventana para seleccionar los componentes en AspenPlus V11.

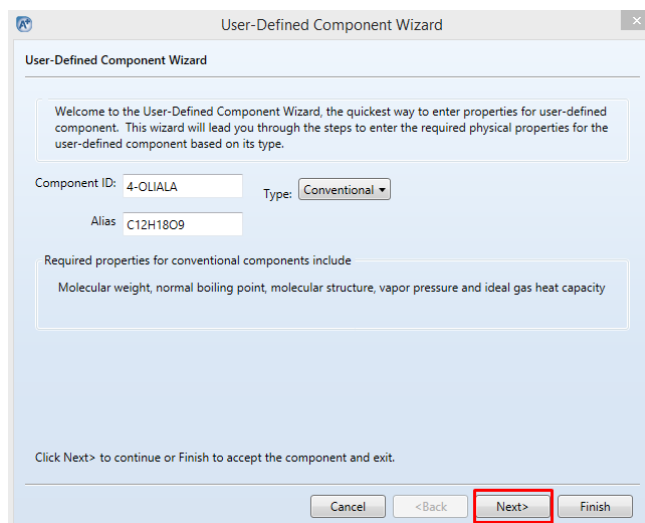


Figura IV.2 Ventana para definir nuevos componentes.

Después de darle clic a **Next** nos pedirá obligatoriamente la estructura molecular del compuesto y opcionalmente algunas propiedades que conocemos.

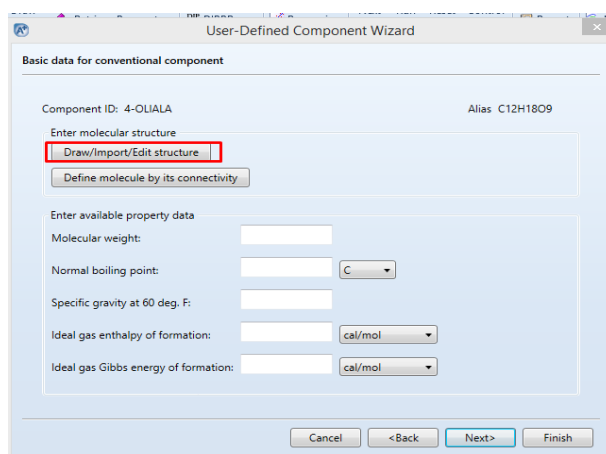


Figura IV.3 Información básica para la creación de un componente.

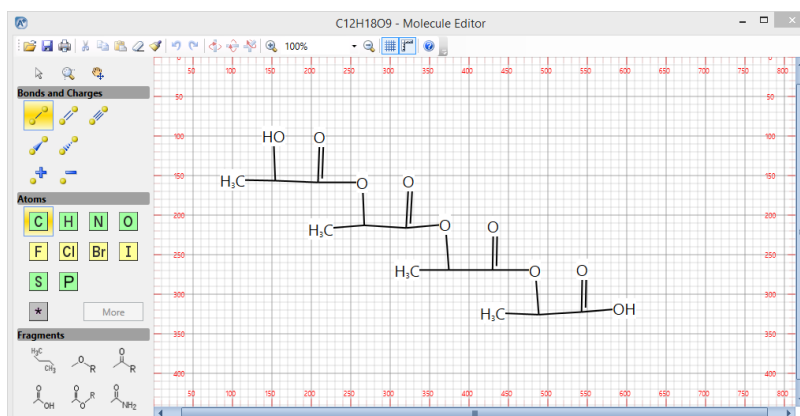


Figura IV.4 Editor Molecular. Estructura del oligómero AL4.

Posteriormente, aparece la opción para estimar las propiedades de la molécula mediante el módulo NIST TDE.

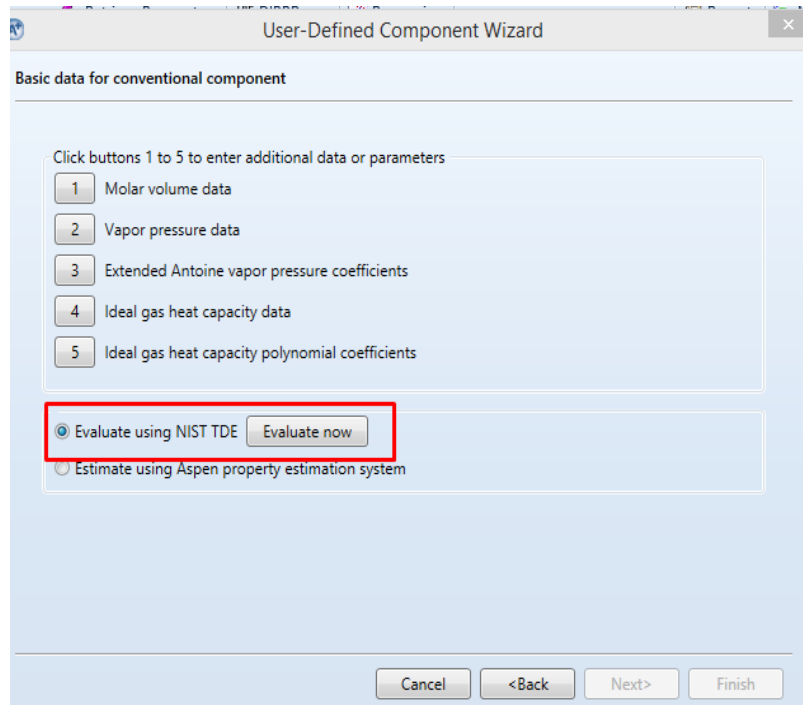


Figura IV.5 *Modulo para evaluar la molécula.*

Por último, se desplegará una ventana con las propiedades estimadas por AspenPlus. A continuación, se dan las propiedades estimadas de 4 oligómeros debido a que se requiere más información para estimar los demás oligómeros.

TABLA IV.1 PROPIEDADES ESTIMADAS DE LOS OLIGOMEROS DEL ÁCIDO LÁCTICO						
OLIGÓMERO	TB (K)	PM	sg	PC (bar)	VC (L/Kmol)	TC(K)
AL1	395	90.079	1.209	59.65	216.9	616
AL2	489	162.142	1.234	34.8	436	660
AL3	619	234.206	1.296	25.5	620	777
AL4	654	306.27	1.568	16.55	768	800
AL5	690	378.33	1.661	14.42	992.9	827

ANEXO 2: ALGORITMO DE ERIC CARLSON

Para la elección del modelo termodinámico se utilizó el algoritmo de Carlson que a continuación se describe:

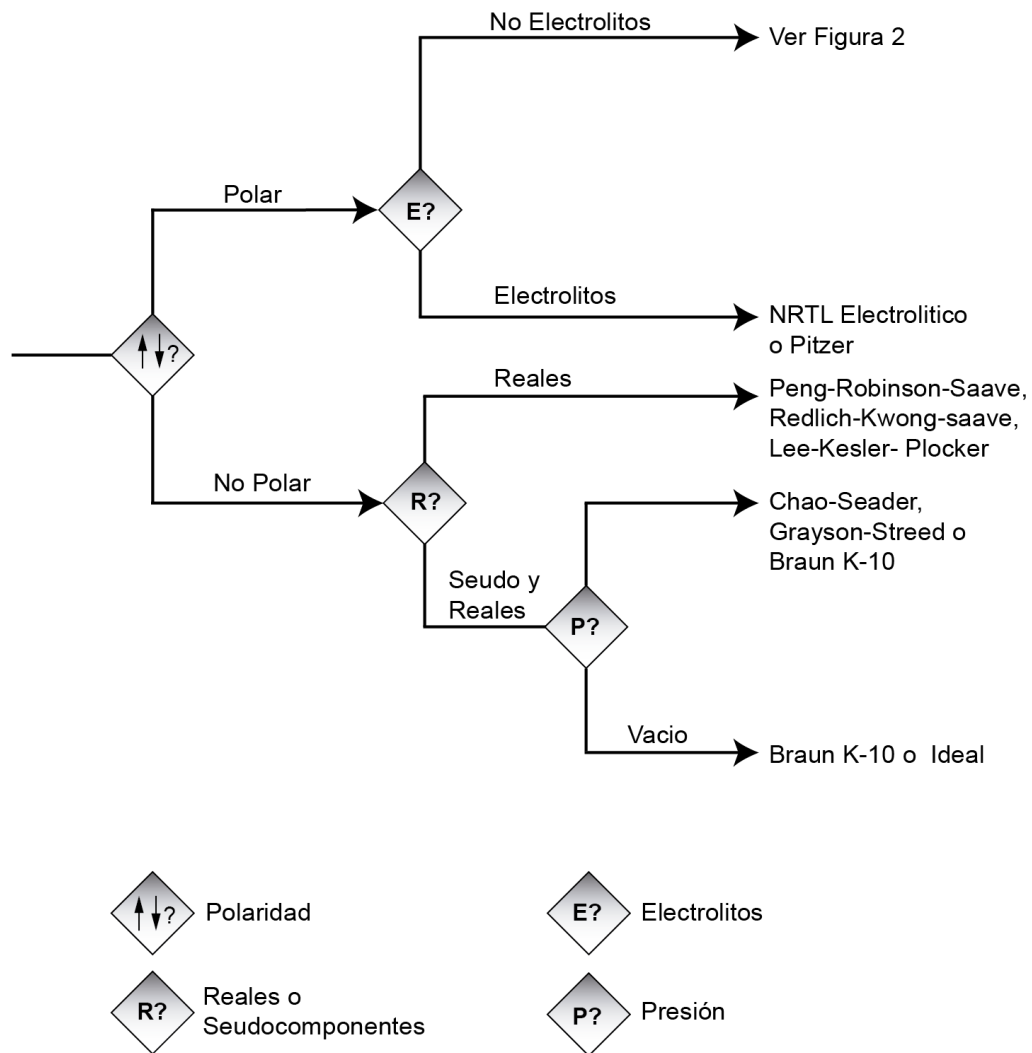


Figura IV.6 Algoritmo de Eric Carlson (parte 1).

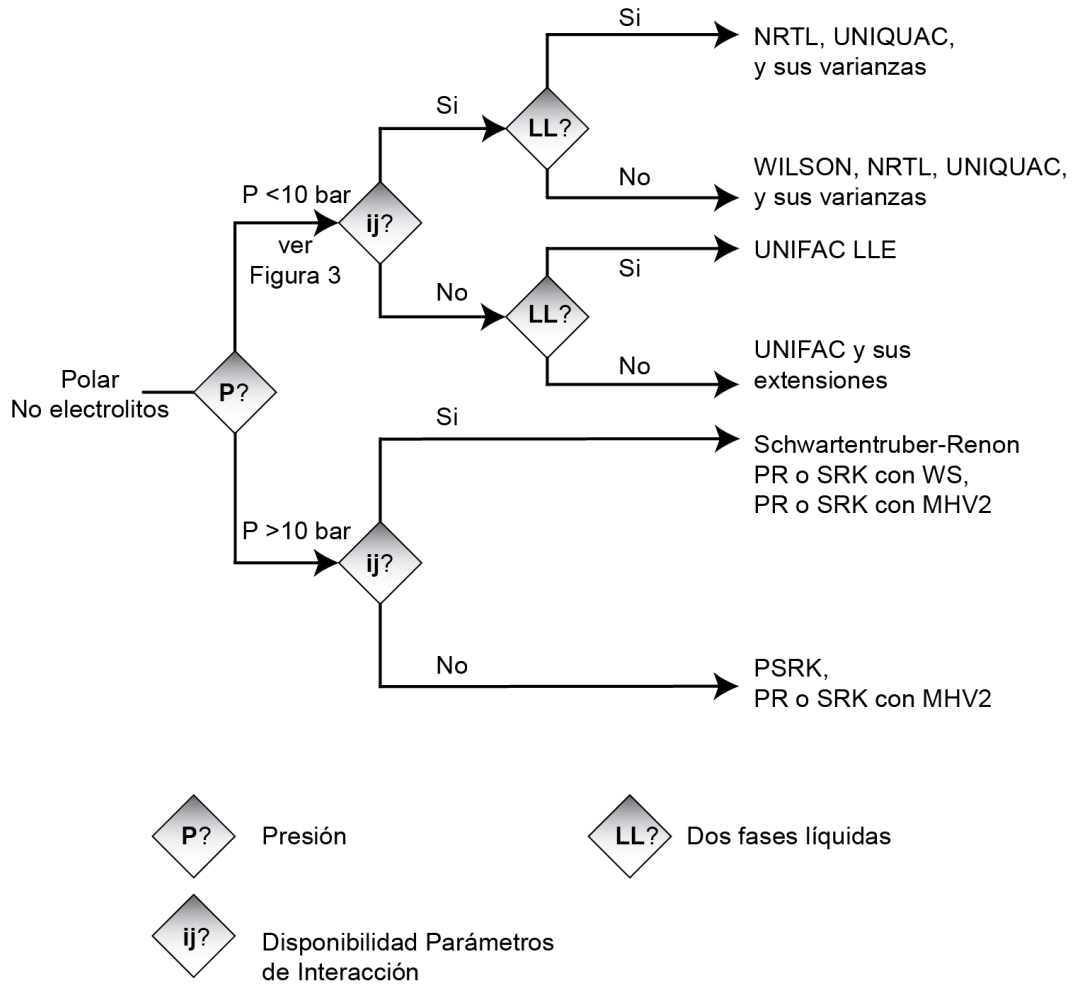


Figura IV.7 Algoritmo de Eric Carlson (parte 2).

En la Figura IV.6 al ser polares y no electrolitos, se continuo a la figura IV.7 en donde al trabajar a presiones menores a 10 bares y al no disponer de los parámetros de interacción del sistema se llegó al modelo termodinámico UNIFAC.

ANEXO 3: PARÁMETROS BÁSICOS DE LA COLUMNA

Como cálculo preliminar para el número de etapas, relación de reflujo tanto el mínimo como el real, se empleó el uso de métodos cortos, para empezar, se empleó la reacción principal para producir LE, con base a la literatura se propuso una relación de 2:1 molar de etanol y AL respectivamente, y una conversión del 80% mol, por lo que se obtuvieron las composiciones de la alimentación y por consecuencia las composiciones del destilado y de los fondos.

Tabla IV.2 *Composición en la alimentación.*

COMPUESTO	FRACCIÓN MOLAR
ETANOL	0.40
AGUA	0.27
ÁCIDO LÁCTICO	0.06
LACTATO DE ETILO	0.27

Tabla IV.3 *Composición en el destilado.*

COMPUESTO	FRACCIÓN MOLAR
ETANOL	0.60
AGUA	0.39
ÁCIDO LÁCTICO	0.01
LACTATO DE ETILO	0.00

Tabla IV.4 *Composición en los fondos*

COMPUESTO	FRACCIÓN MOLAR
ETANOL	0.00
AGUA	0.01
ÁCIDO LÁCTICO	0.19
LACTATO DE ETILO	0.80

Primero se calcularon la temperatura de burbuja para el destilado y los fondos, posteriormente se obtuvo con la ec.1 las volatilidades relativas, luego se empleó la ecuación de Fenske (ec. 2.) para el cálculo de las etapas mínimas, después se calculó el factor de separación con la ec. 3 y con la ecuación de Underwood se calculó el Rmin (ec. 4). Por último, se emplearon la correlación de Gililand (ec. 5) y la correlación de Kirkbride (ec.6) para el cálculo del número de etapas “reales” y las etapas de rectificación y de agotamiento respectivamente.

$$\alpha_{i,HK} = \left[(\alpha_{i,HK})_D (\alpha_{i,HK})_B \right]^{\frac{1}{2}} \text{----- (ec. 1)}$$

$$N_{min} + 1 = \frac{\ln \left[\left(\frac{X_{D,LK}}{X_{D,HK}} \right) \left(\frac{X_{B,HK}}{H_{B,LK}} \right) \right]}{\ln(\alpha_{LK,HK})} \text{----- (ec. 2)}$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i z_i}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \text{----- (ec. 3)}$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i X_{Di}}{\alpha_i - \theta} = 1 - R_{min} \text{----- (ec. 4)}$$

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0.75 \left[1 - \left(\frac{R - R_{min}}{R + 1} \right)^{0.5688} \right] \text{----- (ec. 5)}$$

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{Z_{HK}}{Z_{LK}} \right) \left(\frac{X_{B,LK}}{X_{D,HK}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \text{----- (ec. 6)}$$

ANEXO 4: PARÁMETROS HIDRÁULICOS

En este apartado se describirán los métodos empleados para estimar parámetros hidráulicos como son el diámetro, la caída de presión y el hold up.

Anexo 4.1: Método de Brown-Souder

El método de Brown-Souder sirve para calcular el diámetro de diversas columnas en donde el parámetro más crítico para la estimación del diámetro es el flujo de vapor.

Se emplea la ec.7 para el cálculo del parámetro B_{20} utilizando un espaciado de 24 in entre etapas y posteriormente se hizo la corrección empleando la tensión superficial correspondiente utilizando la ec.8.

Luego se calculó el flux másico del vapor con la ec.9. Y por último se emplearon las ec.10 y ec.11 para el cálculo del área transversal y el diámetro respectivamente.

$$B_{20} = -271.1 + 42.10T_s - 1.254T_s^2 + 0.01297T_s^3 \text{ --- (ec. 7)}$$

$$B_B = B_{20} * \left(\frac{B}{20}\right)^{0.20} \text{ --- (ec. 8)}$$

$$G' = 3.28B_B * [\rho_G * (\rho_L - \rho_G)]^{0.5} \text{ --- (ec. 9)}$$

$$A = \frac{G}{G'} \text{ --- (ec. 10)}$$

$$D = \left(\frac{4A}{\pi}\right)^{0.5} \text{ --- (ec. 11)}$$

Anexo 4.2: Calculo de hL y ΔP

Como primer paso se obtuvieron los datos necesarios plasmados en la siguiente tabla;

Tabla IV.5 Datos necesarios para el cálculo de hL y ΔP

SIMBOLO	PARAMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
ε	Porosidad (Em)	0.944	-
a	Valor (Em)	141.8	m ² /m ³
Dcol	Diámetro de la columna	0.9	m
Vg	Velocidad del gas	1.6176	m/s
ρg	Densidad del gas	4	kg/m ³
μg	Viscosidad del gas	1.23E-05	Pa *s
Cp	Coficiente (Em)	0.371	-
mL	Masa liquido	4.72	kg/s
ρL	Densidad del liquido	1011	kg/m ³
μL	Viscosidad del liquido	0.0006	Pa*s
Ch	Coficiente (Em)	0.587	-

Posteriormente se calcularon el diámetro efectivo de partícula (dP), el factor de pared (kP), el número de Reynolds de la fase gaseosa (ReG), el coeficiente de resistencia del empaque seco (ψ) y la caída de presión del gas seco (ΔPo/Z) con las siguientes ecuaciones:

$$dp = 6 \left(\frac{1 - \epsilon}{a} \right) \text{-----} \text{(ec. 12)}$$

$$Kp = \frac{1}{1 + \frac{2}{3} \left(\frac{1}{1 - \epsilon} \right) \left(\frac{dp}{D_{col}} \right)} \text{-----} \text{(ec. 13)}$$

$$Re_G = \frac{v_G * dp * \rho_G * Kp}{(1 - \epsilon) * \mu_G} \text{-----} \text{(ec. 14)}$$

$$\psi_o = Cp \left(\frac{64}{Re_G} + \frac{18}{Re_G^{0.08}} \right) \text{----- (ec. 15)}$$

$$\frac{\Delta P_o}{Z} = \psi_o * \frac{a * \rho_G * v_G^2}{2 * \epsilon^3 * Kp} \text{----- (ec. 16)}$$

Después se calcularon la velocidad del líquido (v_L), número de Reynold de la fase líquida (Re_L), número del líquido (Fr_L), coeficiente específico (a_h/a), área superficial específica efectiva del empaque (a_h) y la fracción de acumulación del líquido (h_L).

$$v_L = \frac{4 * \dot{m}L}{\rho_L * \pi * D_{col}^2} \text{----- (ec. 17)}$$

$$Re_L = \frac{v_L \rho_L}{a * \mu_L} \text{----- (ec. 18)}$$

$$Fr_L = \frac{v_L^2 * a}{g} \text{----- (ec. 19)}$$

$$\frac{a_h}{a} = C_h * Re_L^{0.5} * Fr_L^{0.1}, \text{ para } Re_L < 5 \text{----- (ec. 20a)}$$

$$\frac{a_h}{a} = 0.85 * C_h * Re_L^{0.25} * Fr_L^{0.1}, \text{ para } Re_L \geq 5 \text{----- (ec. 20b)}$$

$$h_L = \left(12 * \frac{Fr_L}{Re_L} \right)^{\frac{1}{3}} * \left(\frac{a_h}{a} \right)^{\frac{2}{3}} \text{----- (ec. 21)}$$

Por último, se calculó la caída de presión total del sistema, así como la caída de presión por etapa.

$$\frac{\Delta P}{Z} = \frac{\Delta P_o}{Z} * \left(\frac{\epsilon}{\epsilon - h_L} \right)^{1.5} * e^{\frac{Re_L}{200}} \text{----- (ec. 22)}$$

$$\Delta P \text{ por etapa} = \frac{\Delta P}{Z} * Ts \text{----- (ec. 23)}$$

En la siguiente tabla se resumen los resultados obtenidos;

Tabla IV.6 *Valores obtenidos*

SIMBOLO	PARAMETRO	CANTIDAD	UNIDAD
dp	Diámetro efectivo de partícula	0.0023	m
Kp	El factor de pared	0.9696	-
ReG	Numero de Reynolds de la fase gaseosa	21583.0048	-
ψ_o	Coefficiente de resistencia del empaque seco	0.3016	-
$\Delta P_o/Z$	Caída de presión del gas seco	274.4529	Pa/m
VL	Velocidad del liquido	0.0073	m/s
ReL	Numero de Reynolds de la fase liquida	87.2072	-
FrL	El número del liquido	0.00077	-
ah/a	Coefficiente especifico	0.7452	-
hL	Acumulación del líquido (fracción)	0.0390	-
$\Delta P/Z$	Caída de presión total	452.2203	Pa/m
ΔP (por etapa de 24 in)	Caída de presión por etapa con espaciado de 24 in	275.6735	Pa