

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



COLEGIO DE INGENIERÍA QUÍMICA

Diseño conceptual de un proceso de destilación para la obtención de 1-butanol a partir de la mezcla obtenida de un proceso de fermentación.

Tesis para obtener el grado de:

Licenciatura en Ingeniería Química

Presenta: Iván Paredes Hernández.

Director de Tesis: Dr. Adan Luna Flores

Fecha: Diciembre del 2025



Oficio No. FIQ/AC/136/2025
Asunto: Prórroga de Registro de Tema de Tesis.

C. IVÁN PAREDES HERNÁNDEZ
PASANTE DE LA LICENCIATURA EN
INGENIERÍA QUÍMICA
P R E S E N T E:

Por medio del presente me permito informarle, de la aprobación de la Prórroga de Registro de Tema de Tesis de la Licenciatura en Ingeniería Química cuyo título es el siguiente:

"Diseño conceptual de un proceso de destilación para la obtención de 1-butanol a partir de la mezcla obtenida de un proceso de fermentación"

Con el siguiente contenido:

INTRODUCCIÓN

CAPÍTULO 1	ANTECEDENTES
CAPÍTULO 2	METODOLOGÍA
CAPÍTULO 3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN

CONCLUSIONES
BIBLIOGRAFÍA

Director de Tesis: Dr. Adán Luna Flores.

Lo cual me permito comunicarle para su conocimiento y fines consiguientes aclarando que la vigencia de este tema será únicamente por **TRES MESES**, a partir del **28 de Septiembre al 28 de Diciembre del 2025**

Atentamente
"Pensar Bien, Para Vivir Mejor"
H. Puebla de Z., a 26 de Agosto de 2025


Dr. Rubén Jonatan Aranda García
Secretario Académico



C.c.p. Director de Tesis: Dr. Adán Luna Flores.
C.c.p. Archivo.

Facultad
de Ingeniería
Química

Av. San Claudio s/n, Col. San
Manuel, Ciudad Universitaria,
Puebla, Pue., C.P. 72590
01 (222) 229 55 00
Exts. 7250 y 7251



Autorización de Impresión de Tesis

Ingeniería Química (X)

Ingeniería Ambiental ()

Ingeniería en Alimentos ()

Ingeniería en Materiales ()

Matrícula: 201649325

Al C. Sustentante Iván Paredes Hernández

De acuerdo a la presentación y revisión de la tesis:

Diseño conceptual de un proceso de destilación para la obtención de 1-butanol a partir de la mezcla obtenida de un proceso de fermentación.

se aprueba la impresión y empastado de la misma.

Jurado de examen profesional;

JURADO

PRESIDENTE: GEORGETTE REBOLLAR PEREZ

SECRETARIO: GAMALIEL CHE GALICIA

VOCAL: ADAN LUNA FLORES

Firma:

Fecha de examen: 16 de diciembre de 2025

H. Puebla de Zaragoza a 3 de Diciembre de 2025.

AGRADECIMIENTOS

A la memoria de mi madre, mi ejemplo eterno de amor a la vida.

ÍNDICE

RESUMEN	2
<i>OBJETIVO GENERAL</i>	3
<i>OBJETIVOS ESPECÍFICOS</i>	3
<i>HIPÓTESIS</i>	3
CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES	4
<i>LA QUÍMICA VERDE</i>	4
<i>IMPORTANCIA DE LOS SOLVENTES</i>	4
<i>CARACTERÍSTICAS INDUSTRIALES Y RELEVANCIA ECONÓMICA DEL 1-BUTANOL, ETANOL Y ÁCIDO ACÉTICO.</i>	5
1-Butanol	5
Etanol	5
Ácido acético	6
Producción de 1-Butanol	7
<i>LA IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE SEPARACIÓN</i>	8
<i>TERMODINÁMICA APLICADA AL DISEÑO DE PROCESOS DE DESTILACIÓN</i>	9
Funciones termodinámicas auxiliares	9
Modelos de Composición Local	10
Equilibrio Líquido-Vapor (ELV)	11
ELV para sistemas Binarios, Ternarios y Cuaternarios	12
Mapas de Curvas de Residuo (MCR)	13
Mapa de perfil de la columna (CPM)	13
Modelado mediante simulador	15
Secuencias de destilación	16
CAPÍTULO 2. METODOLOGÍA	17
<i>EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR</i>	17
<i>ELABORACIÓN DE MCR</i>	18
<i>ELABORACIÓN DE CPM PARA 4 COMPONENTES</i>	18
<i>EXPLICACIÓN DEL CÓDIGO.</i>	19
<i>MÉTODO FUGK</i>	19
<i>DATOS INICIALES</i>	21
CAPÍTULO 3. RESULTADOS	23
<i>DIAGRAMAS DE ELV</i>	23
Diagramas Binarios	23
<i>MAPAS DE CURVAS DE RESIDUO (MCR) Y PERFILES DE COLUMNA.</i>	25
Mezcla ternaria	25
Mezcla cuaternaria	27
<i>DISEÑO DEL PROCESO</i>	29
DESTILADOR A	29
DESTILADOR B	31
DESTILADOR C	33
CONCLUSIÓN	36

BIBLIOGRAFIA	37
ANEXO 1 DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE 1-BUTANOL	40
ANEXO 2: CÓDIGO EMPLEADO EN MATLAB PARA EL CALCULO DE LOS PARÁMETROS TERMODINAMICOS, LOS MCR'S Y LOS CPM	42

Diseño conceptual de un proceso de destilación para la obtención de 1-Butanol a partir de la mezcla obtenida de un proceso de fermentación.

RESUMEN

La Química Verde busca impactar de manera positiva sobre el medio ambiente y la salud humana ya que estos han sufrido daños, principalmente causados por los solventes tradicionales. En este sentido el 1-Butanol se posiciona como una alternativa sostenible a largo plazo. El 1-Butanol puede obtenerse a partir de un proceso de fermentación, sin embargo, su pureza no cumple con los estándares de la industria. Para solucionar este problema, el presente trabajo se enfoca en el diseño conceptual de un proceso de separación eficiente que permita obtener 1-Butanol con la pureza necesaria.

La metodología se basó en emplear herramientas termodinámicas para analizar la mezcla obtenida a partir de un proceso de fermentación, para esto, se generaron diagramas de Equilibrio Líquido-Vapor, Mapas de Curvas de Residuo (MCR) y Mapas de Perfiles de Columna (CPM), los cuales permitieron visualizar el comportamiento de la mezcla en el Equilibrio Líquido-Vapor (ELV), identificar regiones de destilación y definir las composiciones clave para el diseño de una columna de destilación. Posteriormente, se aplicó el método corto Fenske-Underwood-Gilliland-Kirkbride (FUGK) para el diseño preliminar de las columnas, validando el proceso mediante simulación en ASPEN Plus y configurando una secuencia de destilación.

Como resultado, se estableció un proceso para la purificación de 1-Butanol, alcanzando una pureza del 82.4%. El trabajo demuestra la efectividad de emplear MCR y CPM para el diseño conceptual de procesos de separación de mezclas multicomponentes complejas.

OBJETIVO GENERAL

Realizar el diseño conceptual de una columna de destilación para la obtención de 1-Butanol generado durante la fermentación con *Clostridium tyrobutyricum*.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Obtener los datos de equilibrio líquido-vapor de los sistemas binarios, ternarios y cuaternarios de la mezcla.
- Determinar la existencia de azeótropos en la mezcla.
- Elaborar los mapas de curvas de residuo de las mezclas ternaria y cuaternaria.
- Identificar las zonas de destilación en el mapa de curvas de residuo.
- Proponer el diseño conceptual de una columna de destilación mediante simulación.

HIPÓTESIS

Es posible, mediante un mapa de curvas de residuo, diseñar una columna de destilación para la purificación de 1-Butanol proveniente de una fermentación.

CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES

LA QUÍMICA VERDE

Existen años de trayectoria donde ponentes como Anastas (1991) empiezan a vislumbrar y forjar la idea de una Química Verde como área de la Ingeniería Química. La definición de la Química Verde ha cambiado con los años, pero la idea principal sigue siendo la misma. Paul T. Anastas y Tracy C. Williamson, ambos pertenecían a la oficina de prevención de contaminantes de la Environmental Protection Agency (EPA) cuando en el año de 1996 la Sociedad Americana de Química organiza un simposium, ahí fue donde Tracy y Paul definen el concepto de Química Verde de la siguiente forma:

“La Química Verde es el uso de técnicas y metodologías químicas para reducir o eliminar el uso o generación de materias primas, productos, subproductos, disolventes, reactivos, etc., que son peligrosos para la salud humana o el medio ambiente”.

Delimitar el campo de estudio de la Química Verde ayuda a tener control y saber cómo administrar la información. Las soluciones de ingeniería, los controles de inventarios, mantenimientos, son necesarios y logran la prevención de la contaminación, pero no es Química Verde (Anastas y Williamson, 1996); si bien son buenas formas de disminuir la contaminación ambiental y mejorar nuestro entorno, la Química Verde solo emplea procesos o reacciones químicas para la reducción de contaminantes (Castro, 2011).

IMPORTANCIA DE LOS SOLVENTES

El uso de solventes es una estrategia fundamental para incrementar la productividad en diversos procesos industriales como: disolvente de materias primas, productos y residuos; agentes de limpieza para eliminar impurezas; y auxiliares operativos (modificadores de viscosidad, tensoactivos, plastificantes o agentes protectores). Además, son esenciales en operaciones de purificación y separación de compuestos químicos, donde optimizan el rendimiento y eficiencia (Xochitl, 2013).

Los solventes no son directamente responsables de la composición de un producto de reacción, ni es el componente activo de una formulación, por lo tanto, el uso de solventes tóxicos, inflamables o dañinos para el medio ambiente parecería innecesario porque estas características no tienen impacto en la función o el progreso del sistema en el que se aplica el solvente (Byrne et al, 2016). Los solventes solo dispersan una sustancia en su seno, es decir, es el medio dispersante de la disolución (Xochitl, 2013).

De acuerdo con diversos autores, los principales solventes propuestos por la Química Verde para sustituir a los tradicionales son: agua, acetato de n-propilo, acetato de i-propilo, 1-Butanol y 2-butanol (Byrne et al 2016), debido a que presentan un daño mínimo o nulo al ser humano. Los solventes tradicionales pueden generar daños al ser humano de forma directa

como irritación, quemaduras, etc., así como también pueden ser precursores de enfermedades como leucemia (Torres Aguiar et al., 2018).

CARACTERÍSTICAS INDUSTRIALES Y RELEVANCIA ECONÓMICA DEL 1-BUTANOL, ETANOL Y ÁCIDO ACÉTICO.

Los alcoholes y ácidos carboxílicos como el 1-Butanol, etanol y ácido acético son compuestos químicos de gran importancia industrial, con aplicaciones que van desde la producción de combustibles renovables hasta la fabricación de solventes y aditivos. A continuación, se presenta una breve revisión de sus propiedades generales, principales procesos de obtención, aplicaciones en diversos sectores y su impacto en el mercado global, con el fin de destacar su valor económico y su potencial como sustitutos o complementos de productos derivados del petróleo.

1-BUTANOL

El 1-Butanol es un alcohol de cuatro átomos de carbono con un grupo hidroxilo en una posición terminal. En la industria, se le considera un sustituto potencial del etanol como combustible debido a su menor presión de vapor, que reduce el riesgo de evaporación, y a su mayor densidad energética, lo que proporciona más energía por unidad de volumen. Además, los derivados del 1-Butanol se emplean en la manufactura de plastificantes, cosméticos y disolventes.

Una característica ventajosa del 1-Butanol es su compatibilidad para ser utilizado directamente en motores de combustión interna sin requerir modificaciones mecánicas significativas. Es el único biocombustible producido por microorganismos que puede emplearse puro o como componente de una mezcla, gracias a su miscibilidad con hidrocarburos de cadena larga, incluida la gasolina (Artois, 2020).

De acuerdo con el Observatorio de Complejidad Económica (OEC por sus siglas en inglés), el mercado global de 1-Butanol movió aproximadamente 536 millones de dólares en 2022, posicionándolo como el productor número 2864 más comercializado del mundo. Los principales exportadores son los Países Bajos y Malasia, que en conjunto contribuyen con el 32.5% del suministro global. Los principales importadores son Estados Unidos de América, China, Corea del Sur e India, representando más de la mitad de las compras mundiales. México importó 55 millones de dólares de 1-Butanol durante 2022, equivalente al 1.04% de las importaciones globales.

ETANOL

El etanol es uno de los primeros compuestos obtenidos mediante procesos enzimáticos, con registros de su producción por fermentación de cereales que se remontan a hace 5,000 años en Egipto. Es un compuesto polar capaz de formar enlaces de hidrógeno, lo que le confiere propiedades como disolvente y anticoagulante. Al mezclarse con agua, se reduce su volumen

debido al tamaño molecular y a la formación de puentes de hidrógeno; en cambio, al combinarse con gasolina contribuye a aumentar el volumen final de la mezcla.

En la industria, funciona como intermediario químico para la síntesis de otros productos y, en la actualidad, desempeña un papel importante como aditivo oxigenante para los combustibles fósiles, gracias a su alto índice de octano, similar al de la gasolina. Sin embargo, su aplicación se ha limitado principalmente a su uso como aditivo y no como combustible único. Al ser obtenido a partir de biomasa como caña de azúcar, maíz, almidón o celulosa, se le denomina bioetanol y se considera como un recurso renovable (Buckeridge y Gokdman, 2011).

El etanol es uno de los alcoholes más importantes a nivel internacional, en el mercado global su valor supera los 1,000 millones de dólares anuales. Su importancia económica radica en su triple función: combustible renovable, aditivo oxigenante para gasolinas y producto químico versátil. De acuerdo con la OEC, países como Estados Unidos y Brasil son los principales productores globales, han desarrollado extensas industrias en torno al bioetanol derivado de maíz y caña de azúcar, respectivamente.

México presenta una situación económica particular respecto al etanol. La nación exportó lo equivalente a 1.86 millones de dólares en 2022. No obstante, para satisfacer la demanda del sector industrial, el país requirió importar, con compras al exterior por 238 millones de dólares en el mismo periodo.

ÁCIDO ACÉTICO

El ácido acético es una materia prima indispensable en diversos procesos industriales. Su principal aplicación, es la fabricación de acetato de vinilo, que funciona como precursor de polímeros y resinas utilizadas en pinturas, adhesivos, recubrimientos y fibras textiles. Además, el ácido acético se emplea para producir diversos ésteres como el acetato de etilo y el acetato de butilo, que son disolventes de uso común en la industria de tintas, lacas y cosméticos (Merli et al., 2021).

El ácido acético es un compuesto de alta relevancia en el mercado químico. En 2022, fue el producto número 1179 más comercializado en el mercado químico, con un movimiento anual de 2,880 millones de dólares. China y Estados Unidos de América dominan el mercado, controlando cerca del 50% de la producción mundial, China posee, por sí sola, más de la mitad de la capacidad productiva global. Otros importantes exportadores son India, Alemania, Bélgica y México, cuyas exportaciones combinadas representan arriba del 50% del mercado mundial. México exportó 1.86 millones de dólares, mientras que sus importaciones ascendieron a 238 millones, cantidad necesaria para abastecer la demanda de la industria nacional.

Al compararse con la acetona, otro solvente industrial importante, el ácido acético demuestra un mayor valor económico. La acetona ocupa el puesto 1748 entre los productos más comercializados, con un movimiento de 1,530 millones de dólares anuales, lo que indica que el mercado del ácido acético es considerablemente más grande.

PRODUCCIÓN DE 1-BUTANOL

Hay diversas formas para producir 1-Butanol, las dos principales son mediante el uso de petróleo y la producción mediante organismos vivos. En este trabajo nos enfocaremos solamente en la producción mediante organismos vivos.

Las principales formas para producir 1-Butanol empleando organismos vivos son:

- Fermentación por lotes: Es un proceso simple con bajo riesgo de contaminación, pero su rendimiento es limitado (Andersche, 1923).
- Fermentación por lotes alimentada: Acelera la reacción, previene la acumulación de sustrato que puede inhibir el proceso y favorece el crecimiento celular.
- Técnica de cultivo continuo: Utiliza una transferencia constante de medios de cultivo para mantener un entorno celular óptimo.
- Reactores de células inmovilizadas: Se encuentran entre los sistemas más productivos en términos de cantidad de 1-Butanol generado.
- Reactores de células con membranas: Emplean ultrafiltración para remover células de modo continuo, aumentando la eficiencia (Dürre, 2007).

La producción industrial de 1-Butanol con organismos actualmente no es rentable en comparación con la de combustibles fósiles, debido a la baja generación de producto, la intolerancia al oxígeno, el lento crecimiento de las colonias productoras de bio-butanol, la toxicidad del butanol hacia la membrana de las bacterias¹ y la acumulación de subproductos en el proceso (Hussain et al., 2022).

Por esta razón la ingeniería metabólica ha centrado la atención de los investigadores en aumentar la producción de 1-Butanol mediante la reducción de la acumulación de subproductos, la utilización de sustratos más baratos y la mejora a la resistencia al 1-Butanol y al oxígeno mediante el uso de bacterias, levaduras y cianobacterias modificadas (Hussain et al., 2022) para hacer viable el proceso de obtención y dejar la dependencia del petróleo

La obtención de 1-Butanol que se toma como referencia para el trabajo de tesis se basan en los trabajos realizados por Wang y Zhangse, donde se realiza un proceso de fermentación mediante la mutación de la bacteria *Clostridium tyrobutyricum* (Wang et al., 2013). Los resultados reportados por (Zang et al, 2018) serán tomados como base para realizar este trabajo. La descripción del proceso es el siguiente: la cepa de *Clostridium tyrobutyricum* ATCC 25755 es incubada anaeróbicamente a 37 °C en un medio compuesto por triptona, glucosa y extracto de levadura (TGY). Durante la preparación de la cepa, se añade 15 µg/mL de tianfenicol, 250 µg/mL de D-cicloserina y 40 mM de lactosa, según se requiriera (Wang et al., 2013). Posteriormente, la cepa se modifica mediante la introducción del gen *adhE2* y la eliminación del gen *catI* (Zang et al, 2018). El proceso de fermentación por lotes se lleva a cabo en un biorreactor de 500 mL con un volumen de trabajo de 250 mL. El medio de

¹ Estudios recientes están modificando la membrana plasmática de las bacterias por edición genética para aumentar su resistencia al entorno (Linney, 2023)

trabajo tiene la siguiente composición por litro de agua destilada: 110 g de glucosa, 5 g de extracto de levadura, 5 g de triptona, 3 g de $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, 1.5 g de K_2HPO_4 , 0.6 g de $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, 0.03 g de $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ y 1 g de L-cisteína (Zhang et al., 2017). El mejor rendimiento que se muestra en la investigación de Zhang, en la fermentación se alcanza a una temperatura de 20 °C y un pH de 6.0, logrando la concentración que se muestra en la Tabla 1.

TABLA 1 COMPOSICIÓN DE LA MEZCLA CUATERNARIA USANDO LA CEPA MODIFICADA CLOSTRIDIUM TYROBUTYRICUM. FUENTE: ZHANG ET AL., 2017.

Tabla 1 Composición de la mezcla cuaternaria obtenida por fermentación

Componente	g/L	PM (g/mol)	mol/L	xi	%
Ácido Acético	15.2	60.05	0.25	0.071	7.11 %
Etanol	8.9	46.07	0.19	0.054	5.43 %
1-Butanol	26.2	74.12	0.35	0.099	9.93 %
Agua	49.7	18.015	2.76	0.775	77.53 %
suma	100		3.56	1.00	100.00 %

LA IMPORTANCIA DE LOS PROCESOS DE SEPARACIÓN

En la industria química, la purificación de sustancias se realiza mediante diversos procesos (operaciones unitarias), siendo la destilación uno de los más utilizados, especialmente para la obtención de combustibles a partir del petróleo crudo. Este proceso, sin embargo, enfrenta desafíos debido a la complejidad del petróleo, que contiene moléculas viscosas y contaminantes como compuestos de azufre y metales pesados (Sholl, 2016). La separación de hidrocarburos basada en sus propiedades moleculares es una alternativa prometedora.

Las operaciones unitarias en la industria química incluyen transferencia de calor, momento y masa. La destilación, que se basa en la transferencia de masa y la diferencia de volatilidad, representa entre el 10 % y el 15 % del consumo energético global. Este proceso es crucial en industrias como la alimentaria, petroquímica y farmacéutica, que representan más del 90 % de la industria química (None & Laurel, 2005). La búsqueda de métodos sostenibles para separar combustibles y reducir el consumo energético es fundamental para mejorar la eficiencia y la calidad de los productos (Sholl, 2016).

TERMODINÁMICA APLICADA AL DISEÑO DE PROCESOS DE DESTILACIÓN

Para el diseño de un proceso de separación por destilación, es importante emplear diagramas de Equilibrio Líquido-Vapor (ELV), usar métodos termodinámicos adecuados para el problema, conocer las características y propiedades de cada componente y cómo interactúan entre ellos.

Las ecuaciones de estado permiten determinar las condiciones del Equilibrio Líquido-Vapor (ELV). La función auxiliar más empleada para la ingeniería química es la función de Gibbs en exceso donde sus variables son la temperatura (T), presión (P) y concentración (x) (*Perry, 2003*). Los modelos termodinámicos permiten explicar fenómenos como el equilibrio de fases. Cada modelo termodinámico tiene diferentes características para hacer aproximaciones cercanas a los valores reportados experimentalmente. Algunos modelos termodinámicos son Wilson, UNIQUAC, UNIFAC, NTRL, entre otros.

FUNCIONES TERMODINÁMICAS AUXILIARES

Una propiedad de exceso es una función termodinámica auxiliar y se emplea a conveniencia, se define como la diferencia entre una propiedad real con la propiedad de forma ideal. La función de Gibbs en exceso es de las más útiles por estar en función de la presión, temperatura y fracción molar, además esta función en exceso representa bien a soluciones con desviaciones considerables en su idealidad.

De forma general la función de Gibbs en exceso se representa como:

$$G^E = G - \sum [(x_i G_i^\circ) - RT \sum x_i \ln x_i] \quad (1)$$

Podemos representar la función de Gibbs en exceso de forma adimensional dividiéndola sobre la constante R y la temperatura, además podemos relacionar la función de Gibbs en exceso con otra función auxiliar conocida como *coeficiente de actividad*:

$$\ln \gamma_i = \frac{G_i^E}{RT} \quad (2)$$

Una desviación positiva se entiende cuando el valor del coeficiente de actividad de una pareja binaria es mayor a uno. Existen diferentes tipos de desviaciones que se relacionan con el enlace de hidrógeno que forma la mezcla (*Henley y Seader, 2003*). Por otro lado, los azeótropos representan una desviación negativa de la ley de Raoult. Cuando un sistema

presenta un azeótropo, esto se puede visualizar mediante los coeficientes de actividad, ya que estos presentan un valor menor a uno (King, 1980).

MODELOS DE COMPOSICIÓN LOCAL

La ecuación de Wilson para sistemas multicomponentes es superior a las de Margules, Van Laar y Scatchard-Hamer. Existen dos limitaciones de la ecuación: la primera es su nula capacidad para predecir compuestos no miscibles y su baja capacidad para predecir máximos y mínimos en la relación de coeficientes de actividad (Perry et al, 2003; Smit y Van Ness, 1996; Renon y Prausnitz, 1968).

La ecuación de Wilson representa la energía libre de Gibbs en exceso en un sistema líquido y emplea un coeficiente de actividad por cada componente que está presente en el sistema. Para explicar la fase gaseosa emplea las presiones parciales y para el caso de la fase líquida se apoya en la concentración. Los parámetros de interacción binaria representan las fuerzas que ejercen entre el componente A y B como se muestran en la Figura 1.

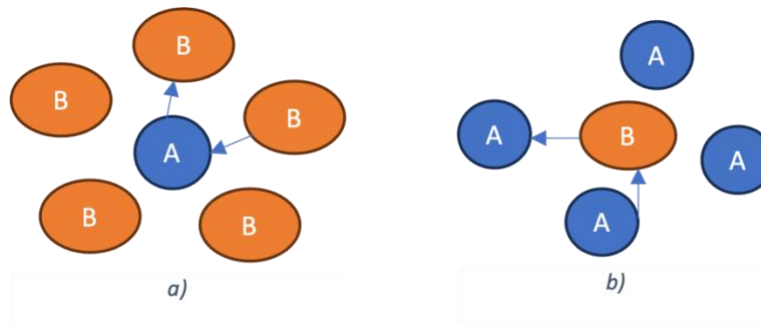


FIGURA 1 FUERZAS DE INTERACCIÓN BINARIA: A) FUERZAS QUE EJERCE EL COMPONENTE A RODEADO DE B; B) FUERZAS QUE EJERCE EL COMPONENTE B RODEADO DE A. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

La ecuación de Wilson para un sistema multicomponente toma la siguiente forma:

$$\frac{G^E}{RT} = - \sum_{i=1}^N x_i \ln \sum_{j=1}^N x_j \Lambda_{ij} \quad (3)$$

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \sum_{j=1}^N x_j \Lambda_{ij} - \sum_{k=1}^N \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_{j=1}^N x_j \Lambda_{kj}} \quad (4)$$

Donde:

G^E = Energía de Gibbs en exceso

x_i = composición del componente i

γ_y = coeficiente de actividad del componente y

Λ_{ij} = parámetro específico entre los compuestos i y j

Los parámetros específicos son dependientes de la temperatura y para calcularlos se emplea la siguiente expresión:

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp \frac{-a_{ij}}{RT} + b_{ij} \quad (i \neq j) \quad \text{Donde:} \quad (1)$$

V = volumen molar de la especie i y j respectivamente

T = temperatura de los fluidos puros

a_{ij} = parámetro de interacción binario

b_{ij} = parámetro de ajuste aplicado en ASPEN

EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR (ELV)

En la industria se desean cambios en la composición de las sustancias, especialmente en las operaciones de transferencia de masa como la destilación, la cual busca comprender cómo coexisten la fase líquida y la fase vapor en un sistema. La transferencia de masa se centra en conocer las temperaturas, presiones y composiciones de las fases en el Equilibrio Líquido-Vapor (ELV).

En la práctica de la ingeniería, la suposición de equilibrio se justifica sólo cuando conduce a resultados de exactitud satisfactoria, como en una columna de destilación donde se supone un equilibrio de fases entre las especies que intervienen en la operación.

El ELV de un sistema se puede entender a partir de la energía de Gibbs; sin embargo, esta describe cantidades primitivas. Por esta razón y para efectos prácticos, se proponen ecuaciones termodinámicas auxiliares como la fugacidad.

Para los sistemas líquido y vapor de una mezcla con comportamiento real, se emplean dos ecuaciones: la primera relaciona el coeficiente de fugacidad con la fase vapor y la segunda ecuación relaciona el coeficiente de actividad con la fase líquida (Smit y Van Ness, 1996).

$$\phi_i \equiv \frac{\hat{f}_i}{y_i P} \rightarrow \hat{f}_i^L = y_i \phi_i P \quad (6)$$

$$\gamma_i = \frac{\hat{f}_i}{x_i f_i} \rightarrow \hat{f}_i^L = x_i \gamma_i f_i \quad (7)$$

Donde:

$\phi_i = \text{coeficiente de fugacidad}$

$\gamma_i = \text{coeficiente de actividad}$

$f_i = \text{fugacidad}$

$x_i = \text{fracción molar de la fase líquido}$

$y_i = \text{fracción molar de la fase vapor}$

El ELV se describe como la igualdad entre las fugacidades de la parte líquida y la parte vapor del sistema.

$$\hat{f}_i^v = \hat{f}_i^L \quad (8)$$

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (9)$$

Para el sistema donde se consideran presiones bajas o moderadas en la fase líquida, el coeficiente de fugacidad se iguala a uno ($\phi=1$, comportamiento ideal), por lo tanto, la ecuación del ELV se entiende como (Smit, Van Ness, 1996)

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (10)$$

ELV PARA SISTEMAS BINARIOS, TERNARIOS Y CUATERNARIOS

Los diagramas de Equilibrio Líquido-Vapor (ELV) proporcionan la relación de equilibrio entre las composiciones del vapor y el líquido, información crucial para el diseño de procesos de separación, como pueden ser las columnas de destilación. Sin embargo, la apreciación de estos diagramas representa únicamente el equilibrio en un instante dado.

Los mapas de curva de residuo (MCR) representan de forma gráfica la composición del líquido (residuo) en un destilador semicontinuo (*Semi-batch*) a través del tiempo. Los mapas se limitan a plasmar los resultados al número de dimensiones que podemos entender y dibujar en el espacio, por lo que, el número máximo para representar una propiedad física puede ser de tres y en raras ocasiones cuatro componentes.

MAPAS DE CURVAS DE RESIDUO (MCR)

Los Mapas de Curvas de Residuo (MCR) marcan el seguimiento del residuo (fondo) de la destilación semibatch a lo largo del tiempo, y se basa en la ecuación de Rayleigh:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{V}{H}(x_i - y_i) \quad (11)$$

Donde V y H representan el flujo molar de vapor y el número de moles instantáneos de líquido, respectivamente.

La fracción líquida no es relativa al tiempo por esta razón se introduce la variable ξ que ayuda a simplificar los cálculos y es relativa al tiempo además de estar asociada con V y H (Doherty y Malone, 2001):

$$d\xi = \frac{V}{H} dt \quad (12)$$

Al asociar ξ con la ecuación de Rayleigh se resuelve la ecuación mediante métodos numéricos con valores iniciales para cuando $\xi=0$ porque $t=0$.

$$\frac{dx}{d\xi} = x - y \quad (13)$$

De acuerdo con Doherty y Malone podemos resolver la ecuación diferencial ordinaria de primer orden con el método de Euler quedando la solución al sistema de la siguiente forma:

$$x_{n+1} = x_n + h[(x_n - y_n(x_n, P))] \quad (14)$$

MAPA DE PERFIL DE LA COLUMNA (CPM)

En 1925, McCabe Thiele publicó un artículo en el que propuso un método gráfico para diseñar la separación de una mezcla binaria (McCabe, 1925). Posteriormente, se desarrollaron las ecuaciones del método FUGK (Fenske-Underwood-Gilliland-Kirkbride) para el diseño con sistemas multicomponentes (Gonzales et al., 2015), que tienen la

particularidad de asumir una volatilidad relativa constante y una separación marcada donde los componentes pueden estar totalmente agotados en el destilado o en el residuo, según sea el caso. Para separaciones de tres compuestos, se puede recurrir a los Mapas de Curvas de Residuo (MCR), cuya representación gráfica puede emplearse de forma análoga al método de McCabe-Thiele. Para mezclas aún más complejas, estas técnicas gráficas son útiles para validar de manera rápida y precisa la viabilidad de una destilación (Doherty, 2001).

En contraste con estos métodos, los Mapas de Perfiles de Columna (CPM) (Beneke et al., 2012) son una técnica de diseño derivada de la adaptación de ecuaciones diferenciales ordinarias, originalmente propuestas por Doherty y colaboradores. Se trata de un método gráfico y generalizado de equilibrio, extremadamente útil para el diseño y análisis de sistemas de destilación, en especial los más complejos. Su principal ventaja reside en que no requiere suposiciones simplificadoras sobre el comportamiento de equilibrio de fases, como la idealidad o la distribución de productos. Precisamente por ser un método completamente generalizado y no estar limitado a ningún equipo en particular, resulta quizás más valioso para idear estructuras nuevas y previamente no concebidas (Beneke et al., 2012).

Los CPM y los MCR simplifican la tarea de trazar la línea de operación para una mezcla multicomponente, de manera similar a como se realiza con un sistema binario mediante la regla de la palanca (similar al método gráfico de McCabe-Thiele) como se aprecia en la Figura 2. Con este método se requiere encontrar un punto de alimentación y un punto de destilado que intercepten una curva de residuo, y extender la línea hasta que vuelva a interceptar la misma curva de residuo, determinando así la composición del fondo. Este método permite obtener las composiciones del destilado (domo) y residuo (fondo).

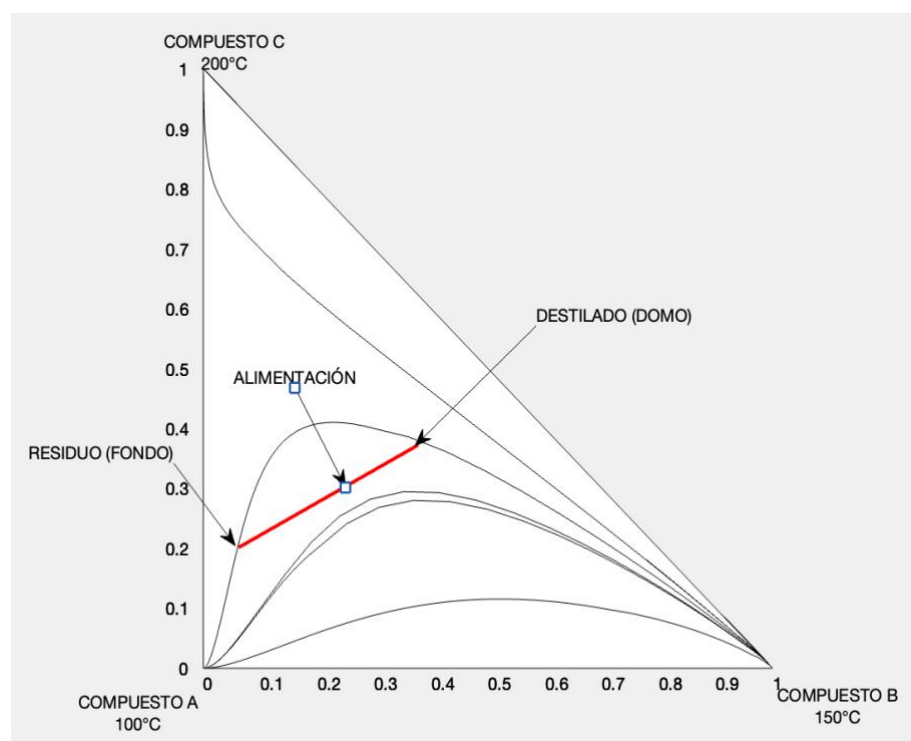


FIGURA 2 FUERZAS DE INTERACCIÓN BINARIA: A) FUERZAS QUE EJERCE EL COMPONENTE A RODEADO DE B; B) FUERZAS QUE EJERCE EL COMPONENTE B RODEADO DE A. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

MODELADO MEDIANTE SIMULADOR

Actualmente los problemas relacionados a la ingeniería química y otras carreras afines se apoyan de programas especializados para el área de estudio, por ejemplo, ASPEN HYSYS especializado en el sector petrolero o ASPEN PLUS enfocado en las demás industrias químicas, ambos desarrollados por la empresa ASPENTEC. Sin embargo, cada programa va enfocado a diferentes clientes con problemas diferentes. Existen diversos simuladores como CHEMCAD o programas de código abierto donde se pueden generar simulaciones con un amplio banco de datos, como por ejemplo Python. ASPEN incluye un amplio banco de datos donde almacena información de ELV de mezclas binarias con datos experimentales, posee diferentes modelos termodinámicos para simular las propiedades de la mezcla, incluye herramientas de regresión que permite ajustar datos de parámetros binarios a partir de datos experimentales, entre otras funciones.

Los programas son versátiles y confiables cuando los parámetros son adecuados, en el caso de generar soluciones de destilación se requieren modelos termodinámicos que representen resultados similares a los presentados por experimentación. Para la elección de un modelo termodinámico correcto se emplea el algoritmo diseñado por Eric C. Carlson director de operaciones en ASPEN. Él desarrollo cinco propuestas para obtener resultados fiables y un diagrama para elegir un modelo termodinámico que se adapte a las necesidades del proyecto.

De acuerdo con Carlson, para crear una simulación exitosa se deben cumplir cinco tareas (Carlson, 1996):

1. Seleccionar un modelo termodinámico apropiado.
2. Validar las propiedades físicas.
3. Describir los componentes que no están en el banco de datos (especies o compuestos químicos) y los parámetros faltantes.
4. Obtener y utilizar datos de propiedad física.
5. Estimar los parámetros de propiedad faltantes.

MATLAB es otro programa empleado; este programa es fundamental para el desarrollo de algoritmos personalizados que resuelven ecuaciones diferenciales complejas, como la ecuación de Rayleigh para la destilación de mezclas multicomponente cuyo cálculo es esencial para trazar las curvas de residuo. Además, MATLAB permite el procesamiento numérico avanzado necesario para implementar modelos termodinámicos, como el de Wilson, y realizar cálculos iterativos de punto de burbuja. Su capacidad de visualización gráfica en 2D y 3D será utilizada para generar los MCR y los CPM, los cuales son indispensables para el análisis gráfico de la viabilidad de la separación y la determinación de las composiciones de destilado y residuo. De esta manera, MATLAB complementa las capacidades de simulación de ASPEN al proporcionar un entorno flexible para el desarrollo de metodologías personalizadas y el análisis detallado de la termodinámica del proceso.

Como tercera herramienta de software, se emplea Microsoft Excel. Su valor reside en la capacidad para organizar cálculos de manera sistemática y en una interfaz sencilla de manipular. Se emplea para construir hojas de cálculo que ejecuten iteraciones y resuelvan ecuaciones específicas, como las ecuaciones FUGK, de forma ordenada. Resulta útil para la

verificación manual de resultados, el análisis intermedio de datos y la realización de cálculos auxiliares que, si bien son esenciales, no requieren del entorno de programación complejo de MATLAB o de la base de datos de Aspen. De este modo, Excel actúa como una herramienta complementaria para la gestión y el cálculo de parámetros fundamentales de manera eficiente y accesible.

SECUENCIAS DE DESTILACIÓN

Existen diversas formas de diseñar la secuencia de un proceso de destilación. En la Figura 3 se pueden apreciar dos sistemas donde se pretende separar cuatro componentes (A, B, C, D). En la primera secuencia, el destilador inicial divide los componentes en dos corrientes (A-B y C-D), las cuales se procesan en paralelo en un segundo y tercer destilador. Así, el destilador 2 separa A de B, mientras que el destilador 3 separa C de D.

Por otro lado, la segunda secuencia ilustra una destilación en serie. En ella, el primer destilador procesa la mezcla A-B-C-D para obtener un destilado A-B-C y un residuo o fondo D. La corriente del destilado pasa luego al destilador 2, donde se separa un destilado A-B de un residuo C. Finalmente, la corriente del destilado se envía al destilador 3 para separar los componentes A y B.

La decisión para elegir la secuencia a seguir dependerá del análisis de los MCR y los CPM. Cada caso es diferente y debe evaluarse de acuerdo con el componente objetivo que se desea obtener.

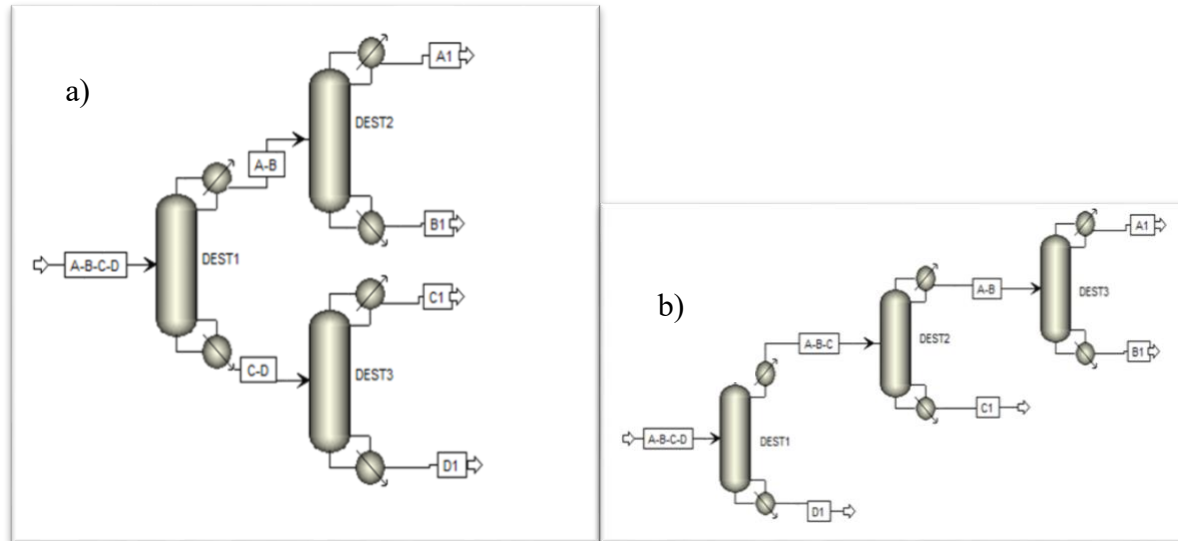


FIGURA 3 SIMULACIÓN EN ASPEN REPRESENTANDO DOS SECUENCIAS DE DESTILACIÓN. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO ASPEN PLUS V8.8.

CAPÍTULO 2. METODOLOGÍA

EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

Para obtener los diagramas de ELV se emplea el algoritmo propuesto por Smith, Van Ness y Abbott (ecuaciones 4 y 10) para el cálculo de temperatura de burbuja, donde γ está en función de la temperatura y composición del sistema. El modelo termodinámico de Wilson calcula γ_i a partir de parámetros de interacción binarios y los $\{x_i\}$, dando buenos resultados para sistemas a presiones bajas y moderadas, sistemas polares, con presencia de alcoholes y en sistemas multicomponente. Las presiones de saturación que están en función de la temperatura se calculan a partir de la ecuación de Antoine.

Smith, Van Ness y Abbott proponen el Diagrama 1 para el cálculo de T de burbuja donde se calculan las $\{y_i\}$ y la T de burbuja dada una composición $\{x_i\}$ y una presión P .

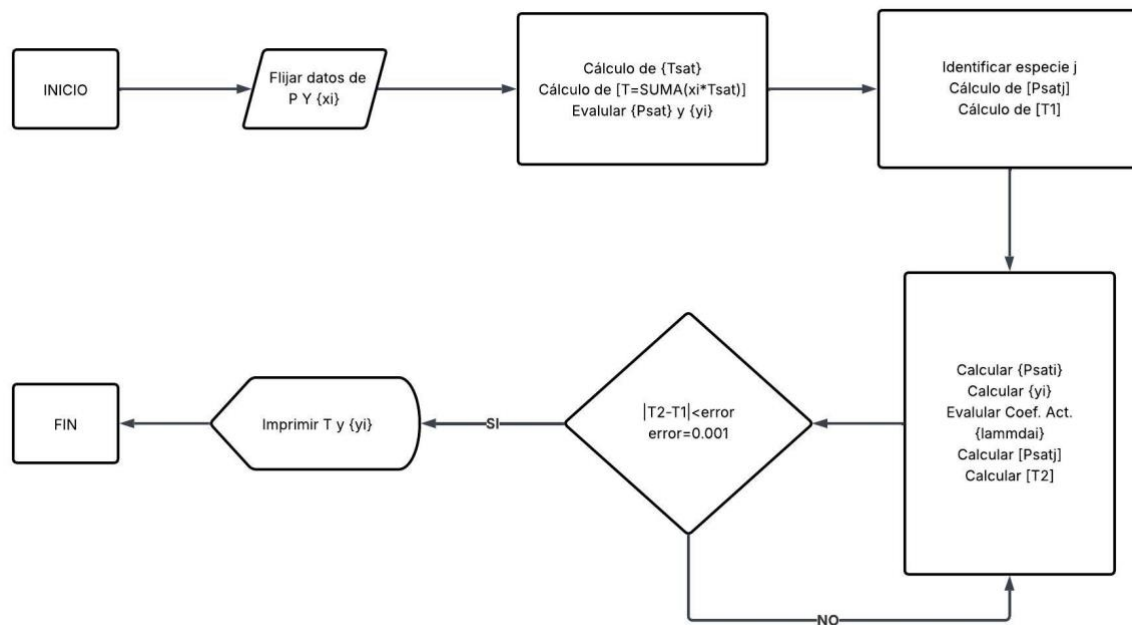


DIAGRAMA 1 CÁLCULO DE TEMPERATURA DE BURBUJA TENIENDO P Y $\{X_i\}$ EMPLEANDO LAS ECUACIONES 4, 5, 10.
FUENTE: SMITH, VAN NESS Y ABBOTT, 1999

Como parte de la metodología, este estudio busca identificar azeótropos que puedan surgir en la mezcla. La detección de estos azeótropos proporciona información crucial que se considero para la toma de decisiones durante la elaboración de los distintos diseños del proceso de purificación (separación).

Al calcular los coeficientes de actividad mediante el método de Wilson, los parámetros de interacción binaria se obtuvieron a través del software de ASPEN PLUS y posteriormente se calculó los coeficientes de actividad creando la primera parte del código en la plataforma de

MATLAB (Anexo A). Para encontrar los coeficientes se desarrolló la ecuación de Wilson para dos, tres y cuatro componentes (Anexo B).

ELABORACIÓN DE MCR

El cálculo de las curvas de residuo se obtiene resolviendo la ecuación de Rayleigh (ecuación 13) por medio de métodos numéricos definiendo un número de pasos n , el tamaño de paso ξ , un valor inicial $\{x\}$ y calculando la $\{y\}$.

La construcción de los MCR describe la trayectoria del residuo remanente en un destilador semicontinuo a lo largo del tiempo. Dicha trayectoria se fundamenta en el cálculo de la fracción vapor en un sistema en equilibrio líquido-vapor. Para ello, se utiliza el modelo de Wilson para el cálculo de los coeficientes de actividad, lo que permite determinar el punto de burbuja de la mezcla.

Algoritmo para la generación de un MCR

1. Se fija la presión del sistema y la composición inicial del líquido (x_1, x_2, x_3, x_4).
2. Se calculan los coeficientes de actividad utilizando el modelo de Wilson.
3. Se calculan las composiciones en fase vapor (y_1, y_2, y_3, y_4) y la temperatura de saturación de la mezcla.
4. Se traza la trayectoria de la curva de residuo para el sistema ternario y cuaternario (ecuaciones 13 y 14).
5. Se analiza el MCR y se determinan las regiones de destilación.

ELABORACIÓN DE CPM PARA 4 COMPONENTES

Los CPM constituyen un método gráfico que permite determinar de manera sencilla el comportamiento de las columnas de destilación. Para su creación, se transforman las fracciones molares de cada componente en dos variables que pueden ser representadas en un plano bidimensional (X,Y). La transformación utilizada para obtener las variables X_1 y X_2 se realiza mediante las siguientes ecuaciones:

$$X_1 = \frac{x_1 + x_3}{1 + x_4} \quad (15)$$

$$X_2 = \frac{x_2 + x_3}{1 + x_4} \quad (16)$$

Para trazar los CPM, se implementan estas ecuaciones al programa desarrollado previamente en MATLAB (ANEXO B) para el cálculo de los MCR's.

EXPLICACIÓN DEL CÓDIGO.

El algoritmo implementado en MATLAB calcula la temperatura de burbuja para una mezcla cuaternaria a una presión definida y composiciones iniciales dadas, con el objetivo de trazar sus MCR y los CPM. El código elaborado sigue esta secuencia.

1. **Inicialización y configuración gráfica.** Se invoca la función *quatplot()* para generar una figura 3D que servirá como marco para visualizar las curvas de residuo en el espacio.
2. **Definición de parámetros termodinámicos:** Se introducen los datos del sistema:
 - a. Presión operativa.
 - b. Constantes de Antoine para cada componente.
 - c. Coeficientes de interacción binaria (a_{ij} , b_{ij}) obtenidos de ASPEN para el modelo de Wilson.
 - d. Volúmenes molares líquidos.
 - e. Composiciones líquidas iniciales.
3. **Cálculo iterativo de temperatura de burbuja y composición de vapor:** Para cada punto de la curva, se ejecuta un proceso iterativo que:
 - a. Calcula los coeficientes de actividad utilizando el modelo de Wilson.
 - b. Resuelve iterativamente para la temperatura de burbuja que satisface la condición de equilibrio $\sum y_i = \sum \frac{x_i \gamma_i P_{i sat}}{P} = 1$
 - c. Calcula la composición del vapor en equilibrio para la corriente líquida.
4. **Integración de la ecuación de Rayleigh:** utilizando el método de Euler, se integra la ecuación de destilación diferencial (ecuación 13) para trazar la trayectoria de la curva de residuo.
5. **Procesamiento de datos y transformación:** Los datos de composición de ambas trayectorias se consolidan en una matriz única. Posteriormente, se aplica una transformación de coordenadas (ecuaciones 15 y 16) para proyectar los datos cuaternarios en un plano bidimensional y generar el CPM.
6. **Visualización (Graficación):** Finalmente, se generan dos figuras:
 - a. Un diagrama 3D (MCR) que muestra las curvas de residuo en el espacio de composiciones.
 - b. Un diagrama 2D (CPM) que muestra los perfiles transformados, incluyendo etiquetas, leyendas y formato para su correcta interpretación.

MÉTODO FUGK

El método FUGK se emplea para realizar un diseño preliminar de las columnas de destilación, transformando los resultados gráficos de los CPM en parámetros de operación cuantitativos. La lógica del método sigue una secuencia específica donde el resultado de un cálculo es la base del siguiente:

1. A partir de las composiciones de alimentación, destilado y residuo identificadas con los CPM, y conociendo el flujo de alimentación, se aplican los balances de materia global y por componente para calcular los flujos molares de todas las corrientes.
2. Para las composiciones de destilado y residuo, se calcula la fracción vapor y las constantes de equilibrio (K_i) para cada compuesto utilizando la fórmula donde el coeficiente de actividad se conoce por el método de Wilson:

$$K_i = \frac{\gamma_i * P_i^{sat}}{P_{sat}} \quad (17)$$

3. Se seleccionan los componentes clave ligero (f_{LK}) y clave pesado (f_{HK}).
4. Calcular la volatilidad relativa de cada componente respecto al clave pesado:

$$\frac{K_i}{K_{HK}} \quad (18)$$

5. Determinar la volatilidad relativa media:

$$\alpha_{i,HK} = \left[(\alpha_{i,HK})_D (\alpha_{i,HK})_B \right]^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

6. Con la volatilidad relativa media y las composiciones de clave ligero y pesado en el destilado y residuo, se calcula el número mínimo de etapas teóricas (N_{min}) requeridas para lograr la separación

$$N_{min} + 1 = \frac{\ln \left[\left(\frac{x_{D,LK}}{x_{D,HK}} \right) \left(\frac{x_{B,HK}}{x_{B,LK}} \right) \right]}{\ln (\alpha_{LK,HK})} \quad (20)$$

7. Se resuelve el sistema de ecuaciones de Underwood para encontrar la raíz (θ) y luego calculamos la relación de reflujo mínimo (R_{min}). Este es el parámetro de operación más importante, ya que define el consumo energético mínimo de la columna:

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i z_i}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (21)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{\alpha_i x_{D,i}}{\alpha_i - \theta} = 1 - R_{min} \quad (22)$$

8. Estableciendo una relación de reflujo operativo ($R=1.3$), la correlación empírica de Gilliland permite estimar el número real de etapas teóricas (N) necesarias para la separación, encontrando un equilibrio entre el costo de capital (etapas) y el costo operativo (reflujo):

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X - 1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad (23)$$

$$X = \frac{R - R_{min}}{R + 1} \quad (24)$$

9. Finalmente, con el número total de etapas (N), la ecuación de Kirkbride predice la ubicación óptima del plato de alimentación (N_r/N_s), dividiendo la columna en las secciones de rectificación y de agotamiento:

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{z_{HK}}{z_{LK}} \right) \left(\frac{x_{B,LK}}{x_{D,HK}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0.206} \quad (25)$$

DATOS INICIALES

La selección precisa de los datos iniciales y los parámetros termodinámicos es fundamental para garantizar la confiabilidad de los resultados de la simulación y su concordancia con el comportamiento de un sistema real.

Las propiedades físicas de los componentes puros, esenciales para los cálculos de equilibrio, se presentan en la Tabla 2. Estas incluyen el volumen molar líquido, el punto de ebullición a 1 atm y las constantes de Antoine, necesarias para calcular la presión de vapor de cada componente.

TABLA 2 CONSTANTES DE COMPONENTES PARA VOLUMEN MOLAR (PERRY, 2003), PUNTO DE EBULLICIÓN Y COEFICIENTES DE ANTOINE FUENTE: SMITH, VAN NESS Y ABBOTT, 1999

<i>Componente</i>	Volumen molar	Punto de Ebullición	Coefficientes de Antoine T[=]°C; P[=]Kpa		
	[=] cm ³ /mol	[=] °C	a	b	c
<i>Etanol</i>	58.173	78.37	16.8958	3795.17	230.918
<i>Agua</i>	18.05	100	16.3872	3885.7	230.17
<i>1-Butanol</i>	91.301	117.7	15.3144	3212.43	182.739
<i>Ac. Acético</i>	57.63	117.9	15.0717	3580.8	224.65

Los parámetros de interacción binaria (a_{ij} y b_{ij}) para el modelo de Wilson se obtuvieron mediante un proceso de regresión a partir de datos experimentales de equilibrio líquido-vapor (AmerAmezaga, 1973; Calvar, 2005; Iwakabe, 2001; Seo, 2012; Stabnikov, 1972; Zhu, 2013) disponibles en ASPEN PLUS.

Los parámetros de interacción binaria resultantes se muestran en la Tabla 3. El parámetro a_{ij} es dependiente de la temperatura (a_{ij}/T) y el parámetro b_{ij} actúa como un término de corrección para ajustar con precisión la curva de regresión.

TABLA 3 PARÁMETROS DE INTERACCIÓN BINARIA. FUENTE: ASPEN PLUS V8.8.

A_{ij} / T				
<i>i/j</i>	Etanol	Butanol	Ac. Acético	Agua
<i>Etanol</i>	0	1036.41	134.893	-239.397
<i>Butanol</i>	-179.577	0	239.4308	-889.573
<i>Ac. Acético</i>	691.029	-263.66583	0	120.385506
<i>Agua</i>	-1825.46	-820.316	265.524409	0
B_{ij}				
<i>i/j</i>	Etanol	Butanol	Ac. Acético	Agua
<i>Etanol</i>	0	-2.45208	0.909348	0
<i>Butanol</i>	-0.553425	0	0	0
<i>Ac. Acético</i>	-3.09642	0	0	0
<i>Agua</i>	3.81394	0	0	0

CAPÍTULO 3. RESULTADOS

A continuación, se presentan y analizan los resultados obtenidos durante el progreso de la investigación, los cuales validan la metodología propuesta y demuestran la efectividad al diseñar el proceso de purificación de 1-Butanol. Los resultados se organizan en tres puntos que en conjunto validan los objetivos de este trabajo:

1. **Diagramas de ELV.**
2. **Análisis de MCR y MCD.**
3. **El diseño del proceso.**

DIAGRAMAS DE ELV

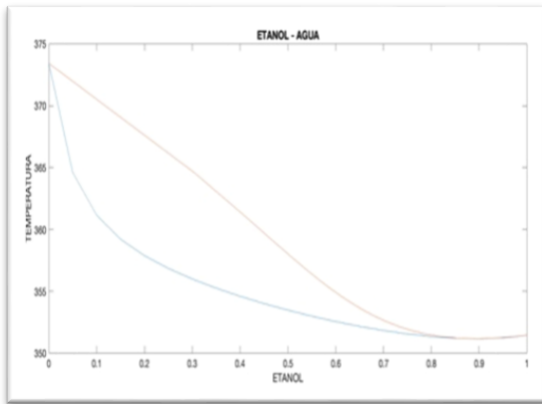
DIAGRAMAS BINARIOS

El primer paso para realizar el diseño es determinar el equilibrio líquido-vapor (ELV) de los sistemas binarios que componen la mezcla. Para ello las concentraciones se variaron de 0 a 1 en la fracción líquida y en la fracción vapor, a una presión de 1atm. Para los cuatro compuestos, existen seis posibles combinaciones binarias, cuyos diagramas se presentan en la Figura 4:

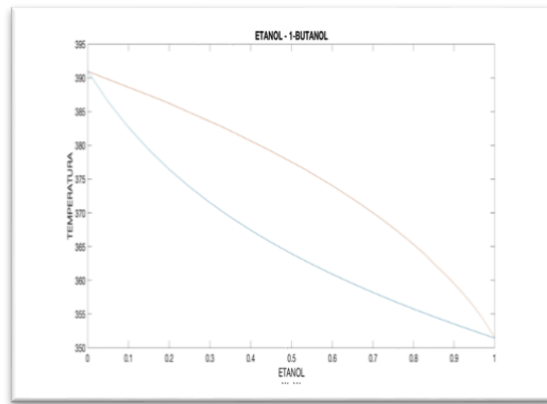
- Agua – Ácido acético.
- 1-Butanol – Ácido acético.
- 1-Butanol – Agua.
- Etanol – Ácido acético.
- Etanol – Agua.
- Etanol – 1-Butanol.

El análisis de los mapas de equilibrio líquido-vapor (ELV) revelan la presencia de tres azeótropos en las mezclas: a) Etanol-Agua (80-99% de Etanol), b) 1-Butanol-Ácido Acético (50% de 1-Butanol) y c) Agua-1-Butanol (76% Agua). En estos sistemas los azeótropos definen dos regiones de destilación, a partir de las cuales se puede obtener el componente puro correspondiente. La información con respecto a los azeótropos es fundamental para realizar el proceso de purificación del 1-Butanol.

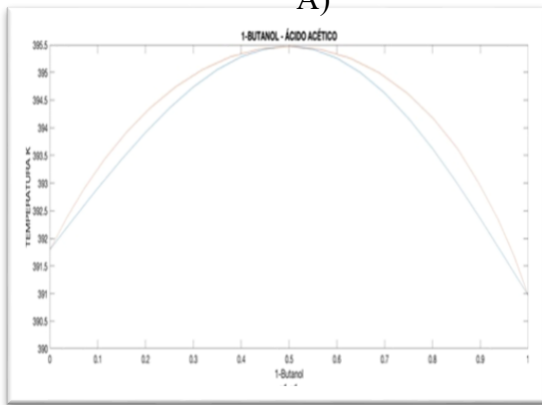
En el caso del sistema etanol-agua solo es posible obtener el compuesto puro agua. Para los demás sistemas, estos pueden considerarse ideales, pues, al no presentar azeótropos, la separación de los componentes puros es prácticamente directa.



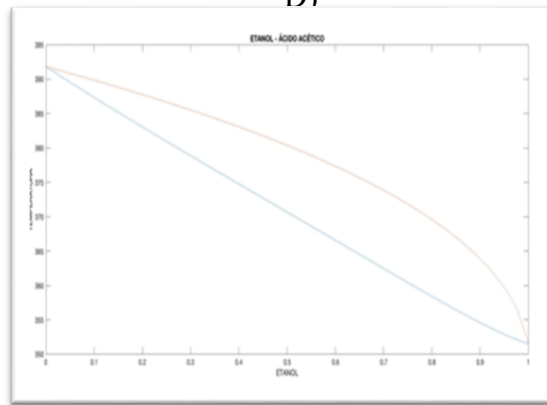
A)



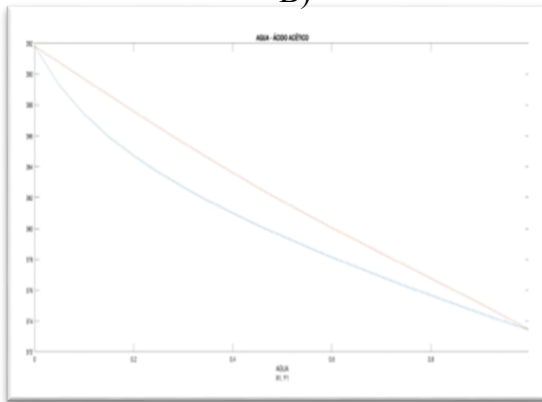
D)



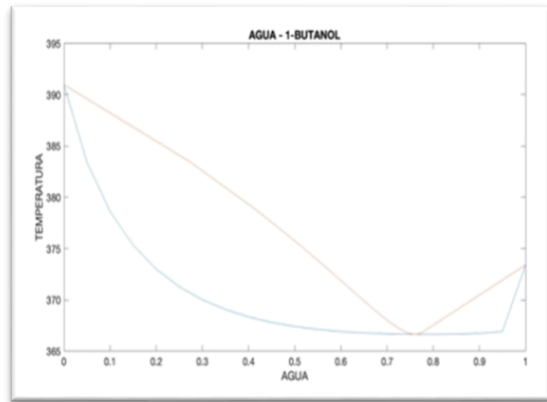
B)



E)



C)



F)

FIGURA 4: MAPA ELV DE MEZCLAS BINARIAS: A)ETANOL-AGUA; B)1-BUTANOL – ÁCIDO ACÉTICO; C)AGUA – ÁCIDO ACÉTICO; D)ETANOL – 1-BUTANOL; E)ETANOL – ÁCIDO ACÉTICO; F)AGUA – 1-BUTANOL. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB.

MAPAS DE CURVAS DE RESIDUO (MCR) Y PERFILES DE COLUMNA.

MEZCLA TERNARIA

Entre más componentes tiene la mezcla se vuelve más compleja a la hora de analizar, para sistemas que tienen más de tres componentes se elaboran los Mapas de Curvas de Residuo (MCR) para las mezclas ternarias posibles. La visualización de estas curvas permite detectar y localizar los azeótropos, así como regiones de destilación en los sistemas ternarios, particularmente en las mezclas que involucran el 1-Butanol.

1. Agua – 1-Butanol – Ácido Acético.
2. Etanol – Agua - 1-Butanol.
3. Etanol – 1-Butanol – Ácido Acético.
4. Etanol – Agua - Ácido Acético.

En la Figura 5 a) se observa el mismo azeótropo presente en la Figura 4 F); en la Figura 5 b) se puede apreciar un punto de silla marcado por el mismo azeótropo que existe entre el Agua y el 1-Butanol. Ninguno de los cuatro sistemas presenta azeótropo ternario.

En el sistema ternario de la figura 5a) puede observarse que la región de destilación está limitada por uno de los componentes puros, 1-Butanol, y por el otro el azeótropo binario entre el agua y el 1-Butanol. En el sistema ternario 5b) el punto de silla nos divide el diagrama en dos regiones de destilación, una limitada por los componentes puros 1-Butanol-Etanol, y la otra región limitada por los componentes puros Agua-Etanol. La figura 5c) está limitada por dos componentes puros (Etanol y 1-Butanol) al igual que la figura 5d) que los componentes puros que se pueden obtener son Ácido Acético y Etanol.

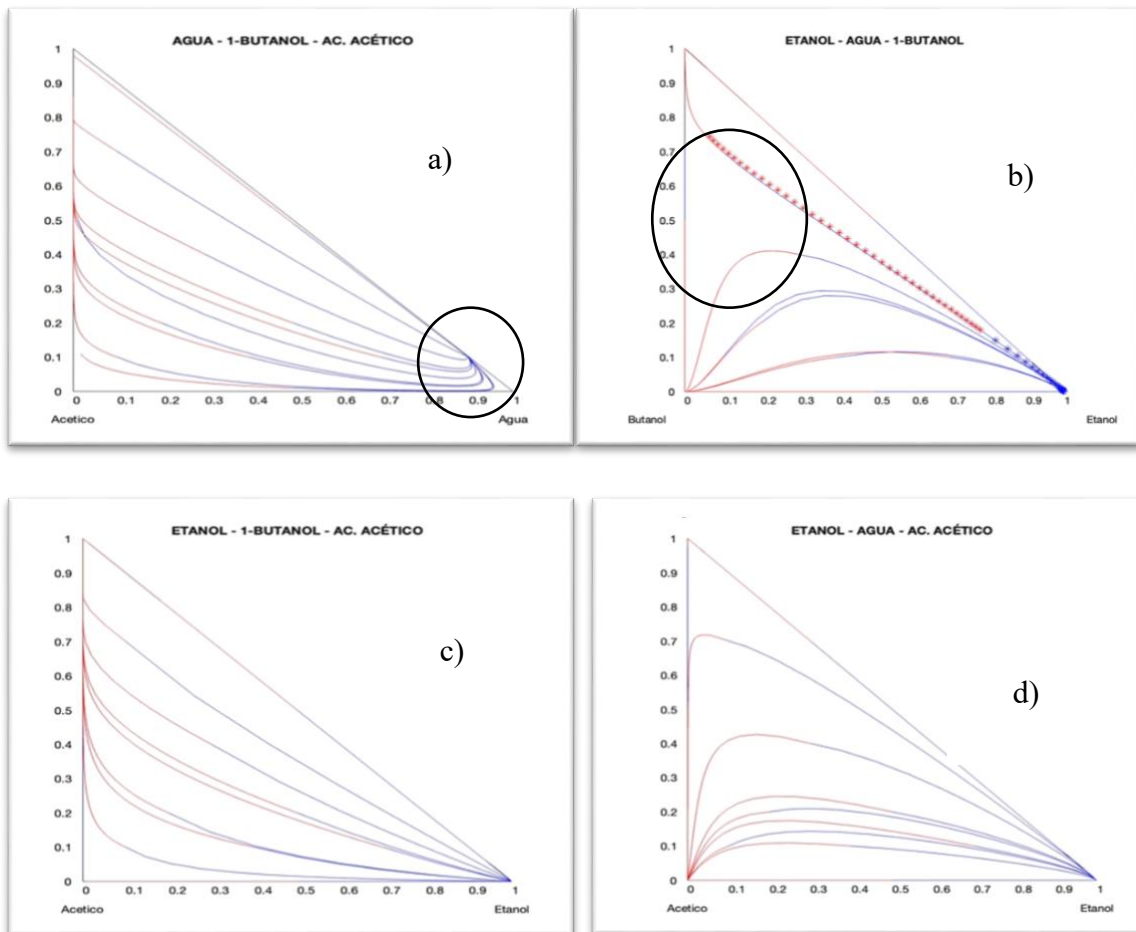


FIGURA 5 DIAGRAMAS DE LOS MCR DE LAS MEZCLAS TERNARIAS. DIAGRAMAS DE LOS MCR DE LAS MEZCLAS TERNARIAS. DIAGRAMAS DE LOS MCR DE LAS MEZCLAS TERNARIAS. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

MEZCLA CUATERNARIA

Para la generación del MCR del sistema cuaternario, se ejecutó el algoritmo a partir de 10 puntos iniciales, el resultado se observa en la Figura 6

En el mapa de curvas de residuo (MCR) mostrado en la Figura 6 se logran apreciar las trayectorias tridimensionales en un sistema multicomponente; la gráfica muestra la posibilidad de obtener tres componentes puros (Etanol, 1-Butanol y Ácido Acético); sin embargo, para obtener más información sobre el sistema ternario debemos realizar un mapa de perfil de curvas CPM. Para realizar un CPM se aplica una transformación a las fracciones molares (x_1, x_2, x_3, x_4) para generar una trayectoria calculable en un mapa de dos ejes (X_1, X_2) empleando las ecuaciones 16 y 17. La Figura 7 muestra el perfil de curvas de residuo transformado a dos dimensiones.

En la figura 7 se muestra el mapa de perfil de columna (CPM) realizado a partir de los resultados de la gráfica de la Figura 6. En el CPM podemos observar que tenemos dos regiones de destilación separadas por el azeótropo (línea negra) que existe entre el Agua y el 1-Butanol, azeótropo que también se puede observar en la Figura 4 (mapa F) y en la Figura 5. En la primera región de destilación es posible obtener los componentes puros agua y ácido acético y en la segunda región de destilación es posible obtener los componentes puros ácido acético y 1-butanol; por esta razón es nuestra región de destilación de interés.

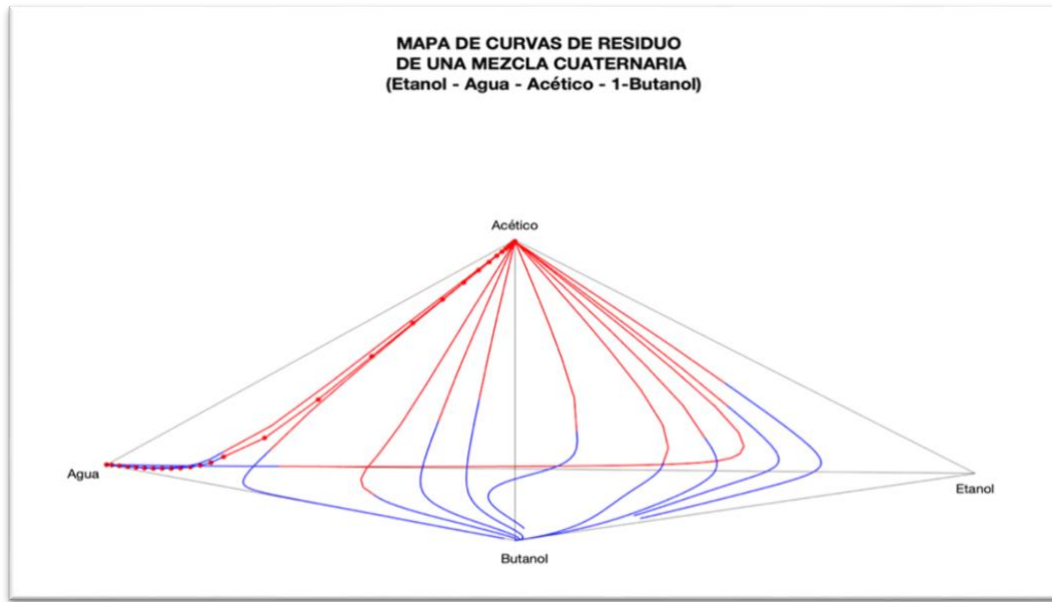


FIGURA 6 GRÁFICA 3D QUE MUESTRA EL MAPA DE CURVAS DE RESIDUO (MCR). LA LINEA TRAZADA CON PUNTOS PRESENTA LA CURVA DE RESIDUO QUE SIGUE LA MEZCLA PROVENIENTE DE LA FERMENTACIÓN. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

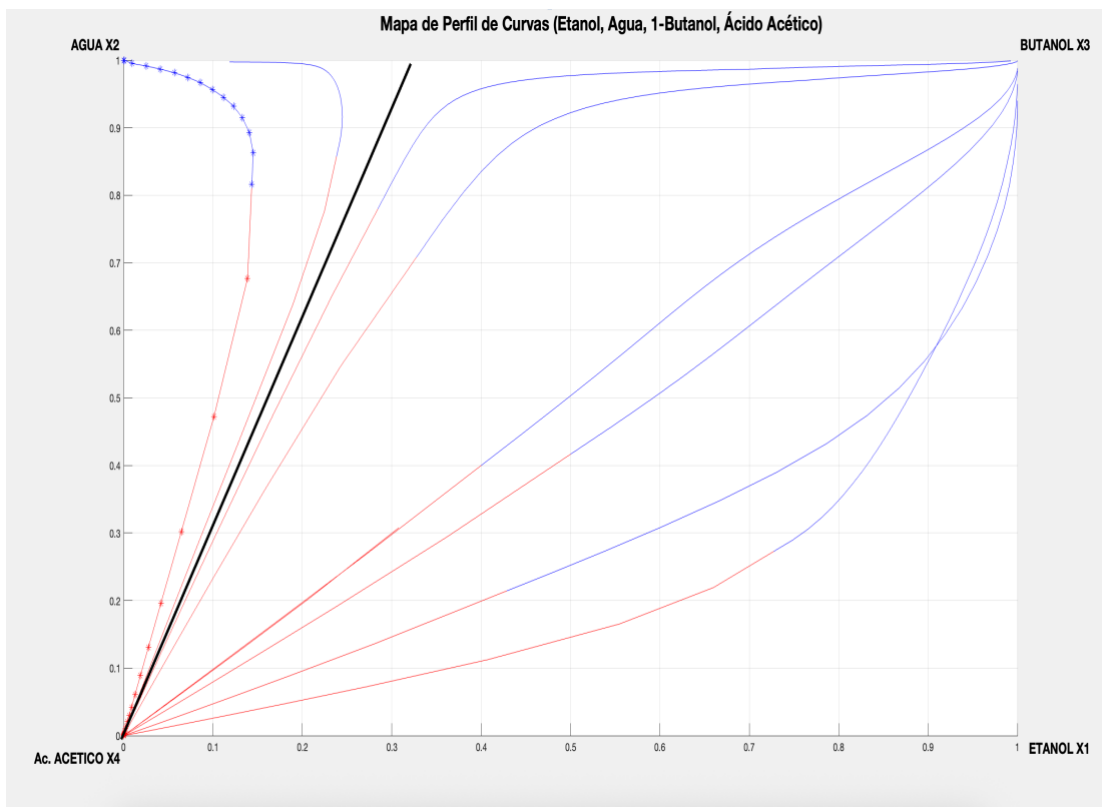


FIGURA 7 MAPA DE PERFILES DE COLUMNA (CPM) DE LA MEZCLA CUATERNARIA ENTRE ETANOL - AGUA - 1-BUTANOL - ÁCIDO ACÉTICO. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

Al trazar la línea de operación podemos calcular las composiciones que hay en la alimentación, en el destilado (domo) y en el residuo (fondo) que se muestran en la Tabla 4. Una vez encontradas podemos apoyarnos del método corto FUGK para realizar el diseño preliminar donde los resultados se muestran en la Tabla 4.

TABLA 4 FRACCIÓN MOLAR DE LA ALIMENTACIÓN, DOMO Y FONDO PARA OBTENER LOS DATOS DEL DISEÑO PRELIMINAR PARA EL DESTILADOR A DONDE SE MUESTRA EL REFLUJO MÍNIMO, NUMERO DE ETAPAS Y PLATO DE ALIMENTACIÓN; PARA INGRESARLOS AL SIMULADOR. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MICROSOFT EXCEL.

DESTILADORA					
Fracción molar en la corriente	ALIMENTACIÓN	DOMO	FONDO	Diseño preliminar	
				R/R Min	1.3
ETANOL	0.1	0.1114	0	N Min	61
AGUA	0.4	0.4432	0.0196	R Min	5.2549
1-BUTANOL	0.4	0.4432	0.0196	R	6.8314
ACÉTICO	0.1	0.0022	0.9608	N	114
FLUJO MOLAR TOTAL	1000	898	102	N Alimentación	62

Los datos anteriores corresponden al diseño preliminar y son la base para una simulación en ASPEN de la columna de destilación con un método riguroso; en este se introducen las composiciones que tenemos de cada corriente y los valores de diseño preliminar que obtuvimos en excel.

ASPEN llega a una convergencia en los cálculos internos y nos da un resumen con información importante acerca de las corrientes (S1, S2, S3) y el comportamiento del destilador.

En la Tabla 5 se observa que en la corriente de destilado (S2) el 1-Butanol presenta un flujo molar de 352.118 kmol/h, lo que equivale a una pureza del 39.1%; además, la presencia de ácido acético disminuyó, pero la mezcla continúa siendo cuaternaria. Por otro lado, la corriente de fondo (S3) está compuesta por una mezcla binaria de 1-Butanol y ácido acético que forma un azeótropo, como se aprecia en la Figura 4 (diagrama b); la cantidad de 1-Butanol disponible en esta corriente es de 48.88 kmol/h, valor considerado demasiado bajo para tomarlo en cuenta y separarlo.

TABLA 5 VALORES OBTENIDOS DEL DESTILADOR A MEDIANTE ASPEN PLUS DONDE SE APRECIAN COMO ESTÁN COMPUESTAS LAS CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN (S1), DESTILADO (S2) Y DE RESIDUO (S3). FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MICROSOFT EXCEL

Columna 1	UNIDADES	S1		S2		S3	
	C	30		103.8802		122.6812	
PRESIÓN	bar	1.0133		1.0133		1.0133	
FLUJO MOLAR	kmol/hr	1000		898		102	
		flujo molar	xi	flujo molar	xi	flujo molar	xi
ETANOI		100	0.1	100	0.11	0	0
AGUA		400	0.4	400	0.45	0	0
1-BUTANOL		400	0.4	351.12	0.39	48.89	0.48
ACÉTICO		100	0.1	46.88	0.05	53.11	0.52
FLUJO MASICO	kg/hr	47467.392		40654.1059		6813.2861	

DESTILADOR B

Con base en el análisis de los resultados de la columna A mostrado en la Tabla 5, la corriente de residuo (S2) contiene suficiente 1-Butanol para realizar una segunda etapa de separación mediante el diseño de una nueva columna de destilación (B). De manera similar al diseño del Destilador A, el proceso para el diseño del segundo destilador se realizará partiendo del mapa de perfiles de columna (CPM) mostrado en la Figura 9.

En la Figura 9 se traza la línea de operación a partir del punto de alimentación correspondiente a la corriente S2, determinando así los puntos de fondo y destilado. En la tabla Tabla 6 se concentran los valores de composición de la alimentación, domo y fondo; así como los resultados de los cálculos con el método FUGK.

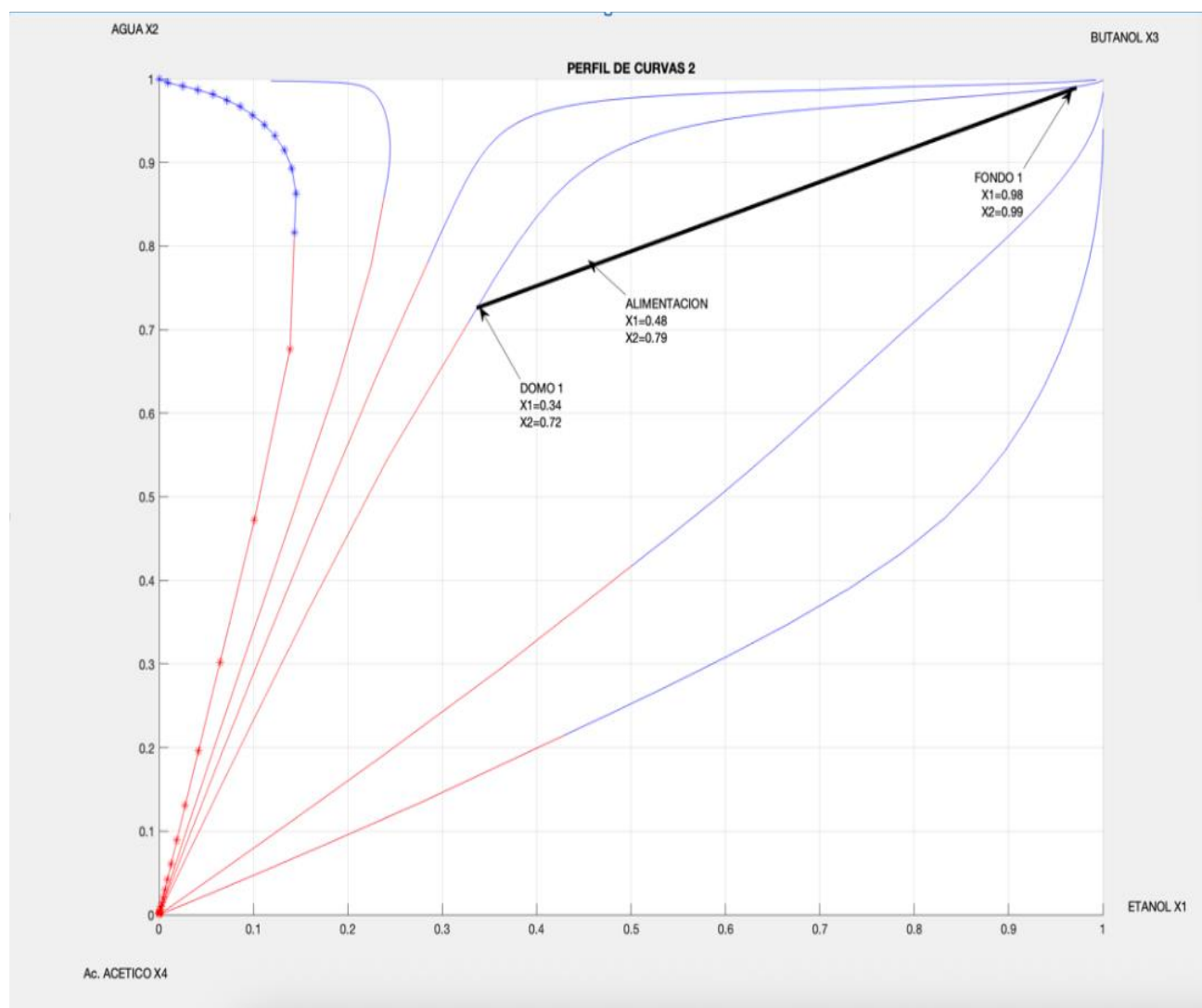


FIGURA 9 LÍNEA DE OPERACIÓN DEL DESTILADOR B PARA OBTENER LAS COMPOSICIONES DEL DESTILADO Y DEL RESIDUO. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MATLAB

TABLA 6 FRACCIÓN MOLAR DE LA ALIMENTACIÓN, DOMO Y FONDO PARA OBTENER LOS DATOS DEL DISEÑO PRELIMINAR PARA EL DESTILADOR B DONDE SE MUESTRA EL REFLUJO MÍNIMO, NUMERO DE ETAPAS Y PLATO DE ALIMENTACIÓN; PARA INGRESARLOS AL SIMULADOR. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MICROSOFT EXCEL.

DESTILADOR B					
Fracción molar en la corriente	ALIMENTACIÓN	DOMO	FONDO	Diseño preliminar	
				R/R Min	1.3
ETANOL	0.1114	0.1984	0	N Min	13
AGUA	0.4432	0.7857	0.0051	R Min	4.1977
1-BUTANOL	0.4432	0.0159	0.9898	R	5.4571
ACÉTICO	0.0022	0	0.0051	N	25
FLUJO MOLAR TOTAL	898	504	394	N Alimentación	9

Finalmente, los valores del diseño preliminar de la Tabla 6 se utilizó para emplear un método riguroso en el simulador ASPEN PLUS (columna RadFrac). En la Tabla 7 se obtienen las corrientes de destilado (S4) y de fondos (S5). Como primera observación, en la corriente S4 se aprecia el agotamiento de ácido acético, generando una mezcla ternaria (Etanol-Agua-1-Butanol), cuyo diagrama se aprecia en la Figura 5; como segunda observación, la cantidad de 1-Butanol disponible en la corriente es de 76.50 kmol/h. Por otro lado, la corriente de fondo (S5) presenta mayor concentración de 1-Butanol, alcanzando un flujo molar de 274.57kmol/h, lo que hace viable el diseño de un tercer destilador. Adicionalmente, debe observarse que la corriente S5 está compuesta por una mezcla ternaria (Agua-1-Butanol-Ácido Acético).

TABLA 7 RESUMEN DE VALORES OBTENIDOS DEL DESTILADOR B AL INGRESARLOS AL SIMULADOR DE ASPEN PLUS. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA USANDO ASPEN PLUS V8.8.

Columna 2	UNIDADES	S2		S4		S5	
	C	103.8802		90.975		104.5007	
PRESIÓN	bar	1.0133		1.0133		1.0133	
FLUJO MOLAR	kmol/hr	898		504		394	
		flujo molar	xi	flujo molar	xi	flujo molar	xi
ETANOL		100.04	0.11	99.99	0.20	0.00	0.00
AGUA		399.97	0.45	327.50	0.65	72.54	0.18
1-BUTANOL		351.12	0.39	76.51	0.15	274.58	0.70
ACÉTICO		46.88	0.05	0.00	0.00	46.89	0.12
FLUJO MASICO	kg/hr	40654.11		16178.61		24475.50	

DESTILADOR C

Los resultados del destilador B muestran que es posible elaborar un diseño para un tercer destilador utilizando la corriente S5 como alimentación. De acuerdo con esta información y siguiendo la metodología establecida para los destiladores A y B, se construye el CPM (Figura 10) de la mezcla ternaria, donde se traza la línea de operación. Al obtener las composiciones de la mezcla ternaria, se realizan los cálculos del método FUGK (Tabla 8). Finalmente, los valores obtenidos en el diseño preliminar del destilador C se ingresan al simulador ASPEN, obteniéndose los resultados que se presentan en la Tabla 9.

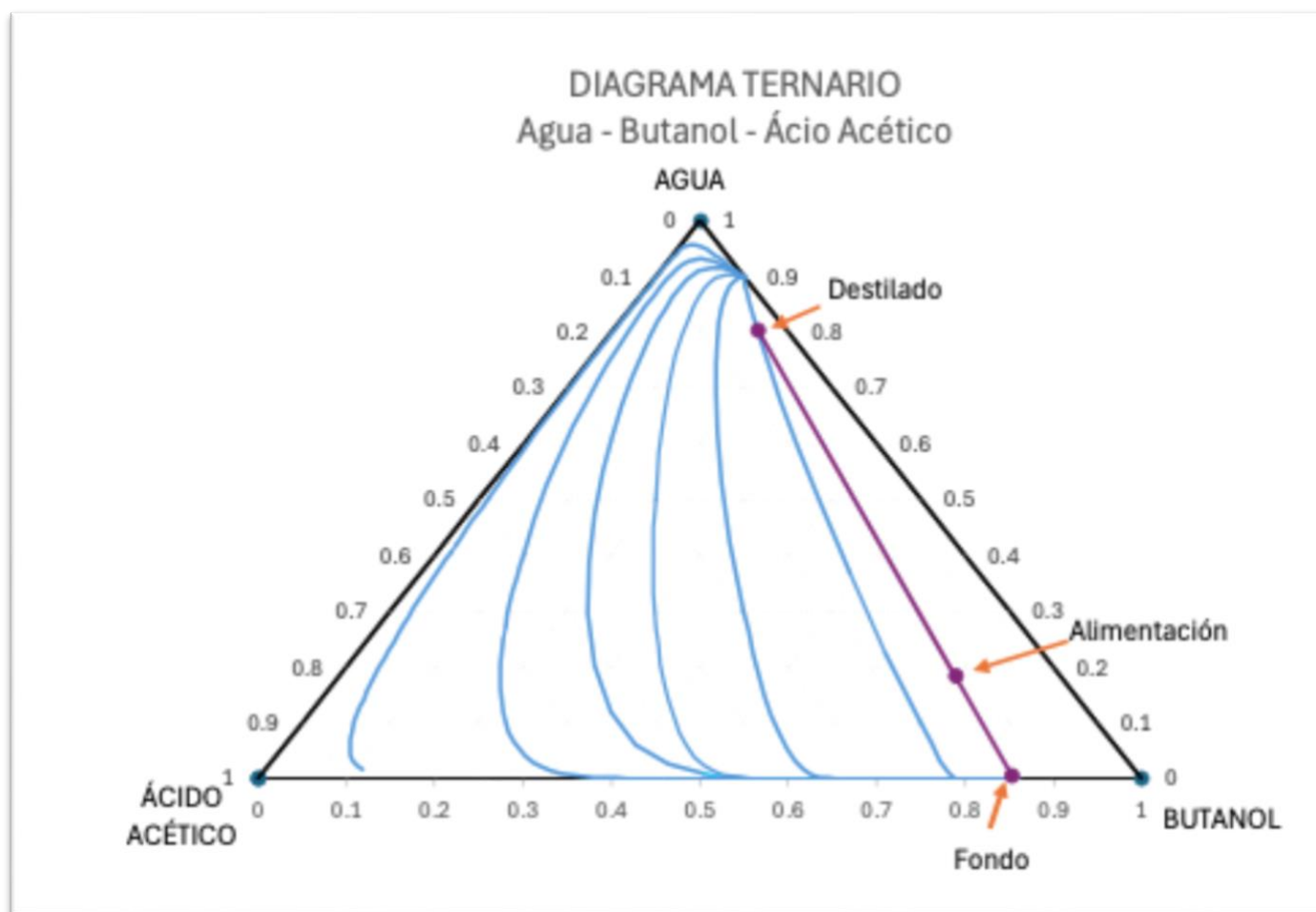


FIGURA 10 LÍNEA DE OPERACIÓN PARA ENCONTRAR VALORES DE LA COMPOSICIÓN DEL RESIDUO Y DEL DESTILADO. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MICRISOFT EXCEL

TABLA 8 FRACCIÓN MOLAR DE LA ALIMENTACIÓN, DOMO Y FONDO PARA OBTENER LOS DATOS DEL DISEÑO PRELIMINAR PARA EL DESTILADOR C DONDE SE MUESTRA EL REFLUJO MÍNIMO, NUMERO DE ETAPAS Y PLATO DE ALIMENTACIÓN; PARA INGRESARLOS AL SIMULADOR. FUENTE: ELABORACIÓN PROPIA UTILIZANDO MICROSOFT EXCEL.

DESTILADOR C					
Fracción molar en la corriente	ALIMENTACIÓN	DOMO	FONDO	Diseño preliminar	
				R/R Min	1.3
ETANOL	0	0	0	N Min	5
AGUA	0.1841	0.8026	0.0047	R Min	1.0738
1-BUTANOL	0.6969	0.1647	0.8512	R	1.396
ACÉTICO	0.119	0.0327	0.144	N	12
FLUJO MOLAR TOTAL	393.9995	88.5491	305.4505	N Alimentación	3

TABLA 9 RESUMEN DE VALORES OBTENIDOS DEL DESTILADOR C AL INGRESARLOS AL SIMULADOR DE ASPEN PLUS. FUENTE: DATOS OBTENIDOS EN ASPEN PLUS V8.8

Columna 3	UNIDADES	S5		S6		S7	
TEMPERATURA	C	104.5007		95.444		116.9279	
PRESIÓN	bar	1.0133		1.0133		1.0133	
FLUJO MOLAR	kmol/hr	394		88.549		305.451	
		flujo molar	xi	flujo molar	xi	flujo molar	xi
ETANOL		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
AGUA		72.54	0.18	65.39	0.74	7.12	0.02
1-BUTANOL		274.58	0.70	22.77	0.26	251.81	0.82
ACÉTICO		46.89	0.12	0.39	0.00	46.49	0.15
FLUJO MASICO	kg/hr	24475.50		2888.89		21586.63	

En la Tabla 9 se aprecia que el destilado (S6) alcanza una concentración del 25.71% (22.76 kmol/h). En la corriente de fondos (S7), el 1-Butanol logra una concentración del 82.44% (251.81 kmol/h), la cual, para los fines de este proyecto se considera adecuada para terminar con la separación. Dado que esta mezcla puede considerarse binaria y presenta un azeótropo pronunciado, como se muestra en la Figura 4, se sugiere continuar la investigación con otros métodos de separación.

Los resultados de los tres destiladores se presentan en el ANEXO 1, en la Tabla 10 se aprecia a detalle el resumen de cada corriente del tren de destilación y en la Tabla 11 se presenta el resumen a detalle de los condensadores y rehervidores de los tres destiladores.

A continuación, en la Figura 11 se muestra el diagrama del proceso para obtener 1-Butanol de acuerdo con nuestra metodología de diseño de separación.

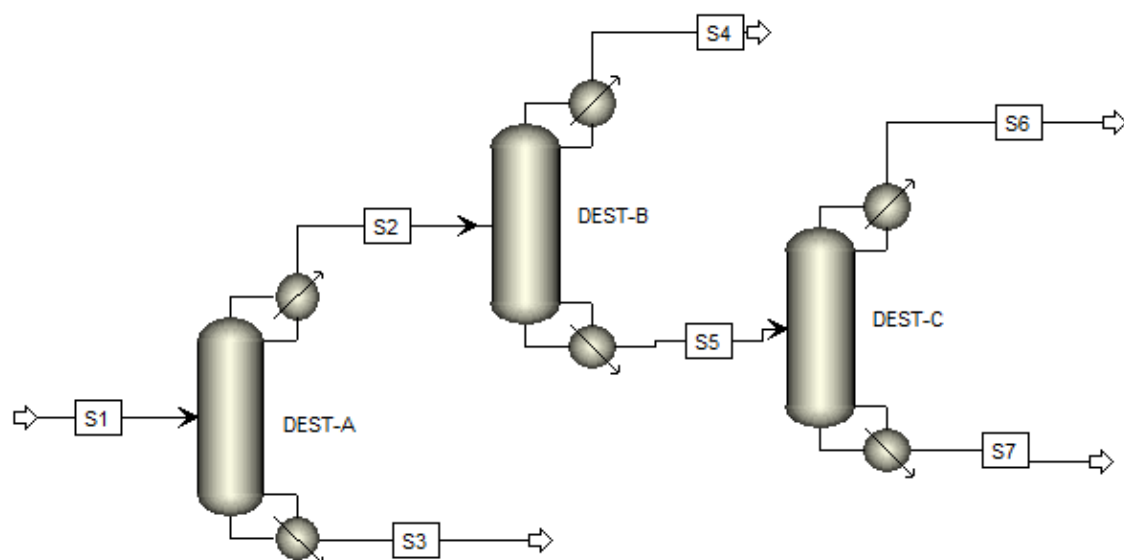


FIGURA 11 DIAGRAMA DEL PROCESOS DONDE SE APRECIAN EL TREN DE DESTILACIÓN Y EL NOMBRE DE CADA CORRIENTE QUE CONECTA CADA COLUMNA. FUENTE: ASPEN PLUS V8.8.

CONCLUSIÓN

El desarrollo de esta tesis sobre la purificación de 1-Butanol contribuirá a la generación de datos sobre sistemas cuaternarios complejos (etanol, agua, 1-Butanol y ácido acético). Estos datos son cruciales para superar los retos actuales en materia ambiental y lograr una producción sostenible a largo plazo.

La implementación de los Mapas de Curvas de Residuo (MCR) y los mapas de perfiles de columnas (CPM) se demuestra como una metodología fundamental para el diseño conceptual de destiladores. Estas herramientas permiten visualizar la trayectoria termodinámica de mezclas complejas, identificar la viabilidad de la separación, detectar la presencia de azeótropos y determinar de forma gráfica las composiciones clave en el destilado y el residuo, creando una base confiable para la aplicación de métodos rigurosos de diseño.

Partiendo de esta metodología, los resultados del diseño confirman una efectividad aceptable en el tren de destilación propuesto para la purificación de 1-Butanol. A partir de una alimentación de 1000.00 mol/h con una carga inicial de 1-Butanol al 40%, se logra obtener una corriente productiva de 251.81 mol/h con una pureza de 82.44%.

El proyecto establece una base viable para el tratamiento de mezclas reales. Se prevé que el avance en la ingeniería genética incrementarán las concentraciones iniciales de este proceso sobre las rutas petroquímicas tradicionales altamente contaminantes.

Para la continuación de esta línea de investigación, se recomienda realizar análisis de energía y una evaluación de costos detallada. Este estudio permitirá cuantificar los costos operativos y de capital, determinando con precisión la viabilidad económica y potencial de escalamiento industrial del proceso, cerrando así la brecha entre el diseño conceptual y su implementación real.

Este trabajo potencia la sostenibilidad al incrementar la competitividad de estos biocombustibles y bioproductos frente a los derivados del petróleo, contribuye al generar conocimiento que reduce la dependencia de patentes extranjeras, y mejora la viabilidad económica de los bioprocesos. Además, crea un puente fundamental entre la producción a escala de laboratorio y la aplicación industrial rentable y sostenible de estos productos de alto valor.

BIBLIOGRAFIA

- Amezaga, S. A., & Fernandez-Biarge, J. (1973). Thermodynamic behavior of some binary acetic acid-alcohol systems in liquid vapor equilibrium. *Anales de Química*, *69*, 569–586.
- Anastas, P. T., Williamson, T. C. (1996). *Green Chemistry: An Overview*. *Acs Symposium Series*, Vol. 626. <https://doi.org/10.1021/bk-1996-0626.ch001>
- Byrne, F. P., Jin, S., Paggiola, G., Petchey, T. H. M., Clark, J. H., Farmer, T. J., Hunt, A. J., McElroy, C. R., & Sherwood, J. (2016). Tools and techniques for solvent selection: green solvent selection guides. *Sustainable Chemical Processes*, 4(1). <https://doi.org/10.1186/s40508-016-0051-z>
- Calvar, N., Domínguez, Á., & Tojo, J. (2005). Vapor-liquid equilibria for the quaternary reactive system ethyl acetate + ethanol + water + acetic acid and some of the constituent binary systems at 101.3 kPa. *Fluid Phase Equilibria*, *235*(2), 215–222. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2005.08.007>
- Carlson, E. C. (1996). Don't gamble with physical properties for simulations. *Chemical engineering progress*, 92(10), 35-46. http://utw10182.utweb.utexas.edu/eldridge/ChE473K/drop_folder/Don't%20Gamble%20With%20Physical%20Properties.pdf
- Castro, N. P. P., & Verbel, J. T. O. (2011). QUÍMICA VERDE: UN NUEVO RETO. *Ciencia e Ingeniería Neogranadina*, 21(2), 169-182. <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=91123440009>
- Cortés González, A. (2023). Efecto de la glicerina semipurificada procedente del proceso de producción del biodiésel sobre el rendimiento de cerdas durante la gestación. *Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*. <https://hdl.handle.net/20.500.12371/19454>
- Fien, G. A. F., & Liu, Y. A. (1994). Heuristic Synthesis and Shortcut Design of Separation Processes Using Residue Curve Maps: A Review. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 33(11), 2505-2522. <https://doi.org/10.1021/ie00035a001>
- Hussain, A., Shahbaz, U., Khan, S., Basharat, S., Ahmad, K., Khan, F., & Xia, X. (2022). Advances in microbial metabolic engineering for the production of butanol isomers (isobutanol and 1-Butanol) from a various biomass. *BioEnergy Research/BioEnergy Research*, 15(4), 1854-1871. <https://doi.org/10.1007/s12155-022-10410-8>

- Iwakabe, K., & Kosuge, H. (2001). Isobaric vapor-liquid-liquid equilibria with a newly developed still. *Fluid Phase Equilibria*, *192*(1–2), 171–186. [https://doi.org/10.1016/S0378-3812\(01\)00617-7](https://doi.org/10.1016/S0378-3812(01)00617-7)
- Linney, J. A., Routledge, S. J., Connell, S. D., Larson, T. R., Pitt, A. R., Jenkinson, E. R., & Goddard, A. D. (2023). Identification of membrane engineering targets for increased butanol tolerance in *Clostridium saccharoperbutylacetonicum*. *Biochimica Et Biophysica Acta (BBA) - Biomembranes*, 1865(8), 184217. <https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2023.184217>
- Merli, G., Becci, A., Amato, A., & Beolchini, F. (2021). Acetic acid bioproduction: The technological innovation change. *The Science Of The Total Environment*, 798, 149292. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.149292>
- None, & Laurel, B. I., MD. (2005). *Materials for Separation Technologies. Energy and Emission Reduction Opportunities*. <https://doi.org/10.2172/1218755>
- Seo, M. D., Kim, Y. J., Lim, J. S., & Kang, J. W. (2012). Measurement and correlation of the isobaric vapor-liquid equilibrium for mixtures of alcohol + ketone systems at atmospheric pressure. *Korean Journal of Chemical Engineering*, *29*(1), 103–110.
- Sholl, D. S., & Lively, R. P. (2016). Seven chemical separations to change the world. *Nature*, 532(7600), 435–437. <https://doi.org/10.1038/532435a>
- Stabnikov, V. M., Metyshev, B. D., Protsyuk, T. B., & Yushchenko, N. M. (1972). Equilibrium in the ethyl alcohol + water system at atmospheric pressure. *Pishchevaya Promyshlennost (Kiev)*, (27), 49–56.
- Torres Aguiar, P., Ramírez, L. S., & Romero Cuello, A. (2018). Leucemia en trabajadores de estaciones de gasolina expuestos a benceno: Revisión sistemática de literatura, 2007-2018. *Universidad del Rosario*. https://doi.org/10.48713/10336_18854
- Wang, Y., Li, X., Milne, C. B., Janssen, H., Lin, W., Phan, G., Hu, H., Jin, Y., Price, N. D., & Blaschek, H. P. (2013). Development of a Gene Knockout System Using Mobile Group II Introns (Targetron) and Genetic Disruption of Acid Production Pathways in *Clostridium beijerinckii*. *Applied And Environmental Microbiology*, 79(19), 5853–5863. <https://doi.org/10.1128/aem.00971-13>
- Xochitl, M. V. (2013) *LOS DISOLVENTES EN LA QUÍMICA VERDE* [Tesis de Licenciatura, Instituto Politécnico Nacional].
- Zhang, J., Zong, W., Hong, W., Zhang, Z., & Wang, Y. (2018). Exploiting endogenous CRISPR-Cas system for multiplex genome editing in *Clostridium tyrobutyricum* and engineer the strain for high-level butanol production. *Metabolic Engineering*, 47, 49–59. <https://doi.org/10.1016/j.ymben.2018.03.007>

Zhang, Z., Taylor, S., & Wang, Y. (2017). In situ esterification and extractive fermentation for butyl butyrate production with *Clostridium tyrobutyricum*. *Biotechnology And Bioengineering*, 114(7), 1428-1437. <https://doi.org/10.1002/bit.26289>

Zhu, D., Gao, D., Zhang, H., Winter, B., Lucking, P., Sun, H., Guan, H., Chen, H., & Shi, J. (2013). [Título del artículo]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 58(1), 41-47.

Libros

Doherty, M., y Malone, M. (2001). *Conceptual design of distillation systems*. New York, NY: McGraw-Hill.

Edwards, C. H., & Penney, D. E. (2009). *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera*. PEARSON EDUCACIÓN.

Green, D. W., Perry, R. H. (2003) *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. séptima edición (McGraw-Hill:España). <https://www.accessengineeringlibrary.com/content/book/9780071422949>

Henley, E. J. y Seader, J. D. (2003) *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en Ingeniería Química*. segunda edición, Editorial Reverté.

King, C. J. (1980). *Procesos de separación*. Editorial Reverte.

Renon, H. y Prausnitz, J. M. (1968). *AIChE J.* vol. 14, p. 135-144.

Smith, J. M., Abbott, M. M., y Van Ness, H. C. (1999). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*. quinta edición (McGraw-Hill: México).

ANEXO 1 DIAGRAMA DE FLUJO DEL PROCESO DE PURIFICACIÓN DE 1-BUTANOL

TABLA 10 RESUMEN DE LA SIMULACIÓN DETALLANDO LA COMPOSICIÓN DE CADA CORRIENTE EN EL TREN DE DESTILACIÓN. FUENTE: ASPEN PLUS V8.8

COLUMNA1	UNITS	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7
FASE		Líquida	Vapor	Líquida	Vapor	Líquida	Vapor	Líquida
TEMPERATURA	C	30	103.9	122.7	91.0	104.5	95.4	116.9
PRESIÓN	bar	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
FLUJO MOLAR	kmol/hr	1000.0	898.0	102.0	504.0	394.0	88.5	305.5
ETANOL	kmol/hr	100.0	100.0	0.0	100.0	0.0	0.0	0.0
AGUA	kmol/hr	400.0	400.0	0.0	327.5	72.5	65.4	7.1
1-BUTANOL	kmol/hr	400.0	351.1	48.9	76.5	274.6	22.8	251.8
ACÉTICO	kmol/hr	100.0	46.9	53.1	0.0	46.9	0.4	46.5
ETANOL		0.111	0	0.198	0	0	0	0.111
AGUA		0.445	0	0.65	0.184	0.739	0.023	0.445
1-BUTANOL		0.391	0.479	0.152	0.697	0.257	0.824	0.391
ACÉTICO		0.052	0.521	0	0.119	0.004	0.152	0.052
FLUJO MASICO	kg/hr	40654.1	6813.3	16178.6	24475.5	2888.9	21586.6	40654.1
ETANOL	kg/hr	4606.9	0.0	4606.9	0.0	0.0	0.0	4606.9
AGUA	kg/hr	7206.1	0.0	5899.6	1306.5	1178.1	128.4	7206.1
1-BUTANOL	kg/hr	26025.1	3624.0	5672.1	20353.0	1687.3	18665.7	26025.1
ACÉTICO	kg/hr	2816.0	3189.3	0.0	2816.0	23.5	2792.5	2816.0
FLUJO VOL.	l/min	449681.3	140.2	245890.4	533.8	43718.1	484.8	449681.3

TABLA 11 RESUMEN CON LOS VALORES DE OPERACIÓN DE LOS CONDENSADORES Y REHERVIDORES DE CADA DESTILADOR. FUENTE: ASPEN PLUS V8.8

VARIABLE	UNIDADES	COLUMNA 1	COLUMNA 2	COLUMNA 3
CONDENSADOR				
		Primer Destilador	Segundo Destilador	Tercer Destilador
NOMBRE	UNIDADES	VALOR	VALOR	VALOR
TEMPERATURA	C	103.88	90.98	95.44
HEAT DUTY	cal/sec	-17726677.00	-7560990.00	-251479.82
DISTILLATE RATE	kg/hr	40654.11	504.00	88.55
REFLUX RATE	kg/hr	374146.92	2750.33	88.55
REFLUX RATIO		9.20	5.46	1.00
REBOILER				
		Primer Destilador	Segundo Destilador	Tercer Destilador
NOMBRE	Units	VALOR	VALOR	VALOR
TEMPERATURA	C	122.68	104.50	116.93
HEAT DUTY	cal/sec	20962440.20	6410789.84	546112.56
BOTTOMS RATE	kg/hr	6813.29	394.00	305.45
BOILUP RATE	kg/hr	578097.44	2225.33	183.21
BOILUP RATIO		84.8485479	5.64805808	24.3835775

ANEXO 2: CÓDIGO EMPLEADO EN MATLAB PARA EL CALCULO DE LOS PARÁMETROS TERMODINAMICOS, LOS MCR'S Y LOS CPM

Algoritmo para el cálculo de T de burbuja mediante una presión y composición del sistema:

La primera llama la funcion quatplot() que nos servira para la graficación de las curvas en un espacio de tres dimensiones.

```
function [fig]=quatplot()
    fig=figure;
    fig.Color='white';
    axis off
    ax=gca;
    V=[0 0 0; 1 0 0; 0 1 0; 0 0 1];
    F=[1 2 3; 1 2 4; 1 3 4; 2 3 4];

    patch('Vertices',V,'Faces',F,'FaceAlpha',0);

    view(40, 0);
    ax.CameraTarget=[0 0 0];
end
function []=quatlabel(A,B,C,D,fig)

N={'Sistema',A,'-',B,'-',C,'-',D};
N=strjoin(N);
fig.Name=N;

text(1, 0, -0.05, A, 'HorizontalAlignment', 'center')
text(0, 1, -0.05, B, 'HorizontalAlignment', 'center')
text(0, 0, -0.05, C, 'HorizontalAlignment', 'center')
text(0, 0, 1.05, D, 'HorizontalAlignment', 'center')
end
```

%Mapa con la ecuación de Wilson Desarrollada

%Etanol-Agua-Butanol-Acetico

P=101.33; %kPa

%constantes de Antoine P[=]Kpa T[=]K

%[Etanol]

A1=16.1952;

B1=3423.53;

C1=-55.7152;

%[Agua]

A2=16.5362;

B2=3985.44;

C2=-38.9974;
%[Butanol]
A3=14.6961;
B3=2902.96;
C3=-102.9116;
%[Acetico]
A4=15.8667;
B4=4097.86;
C4=-27.4937;

%coeficientes de interacción binarios calmol-1

%[Etanol Agua][12]
a12=-239.397;
b12=0;
%[Agua Etanol][21]
a21=-1825.46;
b21=3.81394;
%[Etanol Butanol][13]
a13=1036.41;
b13=-2.45208;
%[Butanol Etanol][31]
a31=-179.577;
b31=-0.553425;
%[Etanol Acetico][14]
a14=134.893;
b14=0.909348;
%[Acetico Etanol][41]
a41=691.029;
b41=-3.09642;
%[Agua Butanol][23]
a23=-820.316;
b23=0;
%[Butanol Agua][32]
a32=-889.573;
b32=0;
%[Agua Acetico][24]
a24=-890.675;
b24=0;
%[Acetico Agua][42]
a42=657.437;
b42=0;
%[Butanol Acetico][34]
a34=2295.24;
b34=-4.9231;
%[Acetico Butanol][43]
a43=4583.21;
b43=-12.1738;

%Volumen liquido molar cm³mol-1

```

V1=58.173; %Etanol
V2=18.050; %Agua
V3=91.301; %Butanol
V4=57.630; %Acetico

x1inicial=[0.054286603;0.18];%Etanol
x2inicial=[0.775252175;0.78];%Agua
x3inicial=[0.099331445;0.03];%Butanol
nu_=length(x1inicial)
for j=1:nu_
    x1=x1inicial(j,1);          %Etanol[1]
    x2=x2inicial(j,1);          %Agua[2]
    x3=x3inicial(j,1);          %Butanol[3]
    x4=1-x1-x2-x3;              %Acetico[4]

    for i=1:40

        %Temperatura de saturación T[=]K
        t1=(B1/(A1-log(P)))-C1;
        t2=(B2/(A2-log(P)))-C2;
        t3=(B3/(A3-log(P)))-C3;
        t4=(B4/(A4-log(P)))-C4;
        %Temperatura ponderada T[=]K
        Tp=t1*x1+t2*x2+t3*x3+t4*x4;

        %Psat por componente
        p1=exp(A1-(B1/(Tp+C1)));
        p2=exp(A2-(B2/(Tp+C2)));
        p3=exp(A3-(B3/(Tp+C3)));
        p4=exp(A4-(B4/(Tp+C4)));
        %Constante de Interaccion
        A12=exp(log(V2/V1)+b12+a12/Tp);
        A21=exp(log(V1/V2)+b21+a21/Tp);
        A13=exp(log(V3/V1)+b13+a13/Tp);
        A31=exp(log(V1/V3)+b31+a31/Tp);
        A14=exp(log(V4/V1)+b14+a14/Tp);
        A41=exp(log(V1/V4)+b41+a41/Tp);
        A23=exp(log(V3/V2)+b23+a23/Tp);
        A32=exp(log(V2/V3)+b32+a32/Tp);
        A24=exp(log(V4/V2)+b24+a24/Tp);
        A42=exp(log(V2/V4)+b42+a42/Tp);
        A34=exp(log(V4/V3)+b34+a34/Tp);
        A43=exp(log(V3/V4)+b43+a43/Tp);

        %Coeficiente de Actividad
        lammda1=exp(1-log(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4)-
        ((x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4)))+(A21*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4)))+(A31*x
        3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4)))+(A41*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

```

```

lammda2=exp(1-log(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4)-
((A12*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A32*x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A42*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
lammda3=exp(1-log(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4)-
((A13*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A23*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A43*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
lammda4=exp(1-log(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4)-
((A14*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A24*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(
A34*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

```

%Presión de agua ec12.13

%P[=]Kpa

```

Pj=P/((x1*lammda1)+((x2*lammda2)*(p2/p1))+((x3*lammda3)*(p3/p1))+((x4*lam
mda4)*(p4/p1)));

```

%Temperatura de especie j

%T[=]K

```

Tj=(B1/A1-(log(Pj)))-C1;

```

%INICIO DE PROCESO ITERATIVO

while 1

%Psat por componente con Tj

```

p1=exp(A1-(B1/(Tj+C1)));
p2=exp(A2-(B2/(Tj+C2)));
p3=exp(A3-(B3/(Tj+C3)));
p4=exp(A4-(B4/(Tj+C4)));

```

%calculo de y1

```

y1=(x1*p1*lammda1)/P;
y2=(x2*p2*lammda2)/P;
y3=(x3*p3*lammda3)/P;
y4=(x4*p4*lammda4)/P;

```

%Constante de Interacción

```

A12=exp(log(V2/V1)+b12+a12/Tp);
A21=exp(log(V1/V2)+b21+a21/Tp);
A13=exp(log(V3/V1)+b13+a13/Tp);
A31=exp(log(V1/V3)+b31+a31/Tp);
A14=exp(log(V4/V1)+b14+a14/Tp);
A41=exp(log(V1/V4)+b41+a41/Tp);
A23=exp(log(V3/V2)+b23+a23/Tp);
A32=exp(log(V2/V3)+b32+a32/Tp);
A24=exp(log(V4/V2)+b24+a24/Tp);
A42=exp(log(V2/V4)+b42+a42/Tp);
A34=exp(log(V4/V3)+b34+a34/Tp);
A43=exp(log(V3/V4)+b43+a43/Tp);

```

%Coeficiente de Actividad

```

lammda1=exp(1-log(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4)-
((x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A21*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A31*x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A41*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
lammda2=exp(1-log(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4)-
((A12*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A32*x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A42*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
lammda3=exp(1-log(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4)-
((A13*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A23*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A43*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
lammda4=exp(1-log(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4)-
((A14*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A24*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(
A34*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

```

%Presión de agua ec12.13 P[=]Kpa

```

Pj=P/((x1*lammda1)+((x2*lammda2)*(p2/p1))+((x3*lammda3)*(p3/p1))+((x4*lam
mda4)*(p4/p1)));

```

%Temperatura de especie j T[=]K

```

Tj2=(B1/(A1-log(Pj)))-C1;

```

%Diferencia de T1

```

dt=abs(Tj-Tj2);
if dt<0.1
    break
end

```

```

Tj=Tj2;

```

```

end

```

```

T(i)=Tj2;p
xa(i,1,j)=x1;
xb(i,1,j)=x2;
xc(i,1,j)=x3;
xd(i,1,j)=x4;

```

%Método de euler para los datos de MCR

```

h=.7;
x1=(y1+h*(x1-y1));
x2=(y2+h*(x2-y2));
x3=(y3+h*(x3-y3));
x4=(y4+h*(x4-y4));
end

```

```

end

```

```

DATA1=[xa,xb,xc,xd];

```

%TIEMPO NEGATIVO

```

for j=1:nu_
    x1=x1inicial(j,1);           %Etanol[1]
    x2=x2inicial(j,1);           %Agua[2]
    x3=x3inicial(j,1);           %Butanol[3]

```

x4=1-x1-x2-x3;

%Acético[4]

for i=1:40

%Temperatura de saturación T[=]K

t1=(B1/(A1-log(P)))-C1;

t2=(B2/(A2-log(P)))-C2;

t3=(B3/(A3-log(P)))-C3;

t4=(B4/(A4-log(P)))-C4;

%Temperatura ponderada T[=]K

Tp=t1*x1+t2*x2+t3*x3+t4*x4;

%Psat por componente

p1=exp(A1-(B1/(Tp+C1)));

p2=exp(A2-(B2/(Tp+C2)));

p3=exp(A3-(B3/(Tp+C3)));

p4=exp(A4-(B4/(Tp+C4)));

%Constante de Interacción

A12=exp(log(V2/V1)+b12+a12/Tp);

A21=exp(log(V1/V2)+b21+a21/Tp);

A13=exp(log(V3/V1)+b13+a13/Tp);

A31=exp(log(V1/V3)+b31+a31/Tp);

A14=exp(log(V4/V1)+b14+a14/Tp);

A41=exp(log(V1/V4)+b41+a41/Tp);

A23=exp(log(V3/V2)+b23+a23/Tp);

A32=exp(log(V2/V3)+b32+a32/Tp);

A24=exp(log(V4/V2)+b24+a24/Tp);

A42=exp(log(V2/V4)+b42+a42/Tp);

A34=exp(log(V4/V3)+b34+a34/Tp);

A43=exp(log(V3/V4)+b43+a43/Tp);

%Coeficiente de Actividad

lammda1=exp(1-log(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4)-
((x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A21*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A31*x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A41*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

lammda2=exp(1-log(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4)-
((A12*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A32*x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A42*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

lammda3=exp(1-log(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4)-
((A13*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A23*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(x
3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A43*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

lammda4=exp(1-log(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4)-
((A14*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A24*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(
A34*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));

%Presión de agua ec12.13

%P[=]Kpa

```
Pj=P/((x1*lammda1)+((x2*lammda2)*(p2/p1))+((x3*lammda3)*(p3/p1))+((x4*lammda4)*(p4/p1)));
```

```
%Temperatura de especie j
```

```
%T[=]K
```

```
Tj=(B1/A1-(log(Pj)))-C1;
```

```
%INICIO DE PROCESO ITERATIVO
```

```
while 1
```

```
%Psat por componente con Tj
```

```
p1=exp(A1-(B1/(Tj+C1)));
```

```
p2=exp(A2-(B2/(Tj+C2)));
```

```
p3=exp(A3-(B3/(Tj+C3)));
```

```
p4=exp(A4-(B4/(Tj+C4)));
```

```
%cálculo de y1
```

```
y1=(x1*p1*lammda1)/P;
```

```
y2=(x2*p2*lammda2)/P;
```

```
y3=(x3*p3*lammda3)/P;
```

```
y4=(x4*p4*lammda4)/P;
```

```
%Constante de Interacción
```

```
A12=exp(log(V2/V1)+b12+a12/Tp);
```

```
A21=exp(log(V1/V2)+b21+a21/Tp);
```

```
A13=exp(log(V3/V1)+b13+a13/Tp);
```

```
A31=exp(log(V1/V3)+b31+a31/Tp);
```

```
A14=exp(log(V4/V1)+b14+a14/Tp);
```

```
A41=exp(log(V1/V4)+b41+a41/Tp);
```

```
A23=exp(log(V3/V2)+b23+a23/Tp);
```

```
A32=exp(log(V2/V3)+b32+a32/Tp);
```

```
A24=exp(log(V4/V2)+b24+a24/Tp);
```

```
A42=exp(log(V2/V4)+b42+a42/Tp);
```

```
A34=exp(log(V4/V3)+b34+a34/Tp);
```

```
A43=exp(log(V3/V4)+b43+a43/Tp);
```

```
%Coeficiente de Actividad
```

```
lammda1=exp(1-log(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4)-  
((x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A21*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A31*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A41*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
```

```
lammda2=exp(1-log(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4)-  
((A12*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A32*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A42*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
```

```
lammda3=exp(1-log(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4)-  
((A13*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A23*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(A43*x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
```

```
lammda4=exp(1-log(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4)-  
((A14*x1/(x1+A12*x2+A13*x3+A14*x4))+(A24*x2/(A21*x1+x2+A23*x3+A24*x4))+(A34*x3/(A31*x1+A32*x2+x3+A34*x4))+(x4/(A41*x1+A42*x2+A43*x3+x4))));
```

```
%Presión de agua ec12.13 P[=]Kpa
```

```
Pj=P/((x1*lammda1)+((x2*lammda2)*(p2/p1))+((x3*lammda3)*(p3/p1))+((x4*lammda4)*(p4/p1)));
```

```

        %Temperatura de especie j T[=]K
        Tj2=(B1/(A1-log(Pj)))-C1;
        %Diferencia de T1
        dt=abs(Tj-Tj2);
        if dt<0.1
            break
        end
        Tj=Tj2;
    end

    T(i)=Tj2;
    xa(i,1,j)=x1;
    xb(i,1,j)=x2;
    xc(i,1,j)=x3;
    xd(i,1,j)=x4;
Método de euler para los datos de MCR
    h=.09;
    x1=x1+h*(x1-y1);
    if x1<0.00001
        x1=0;
    end
    x2=x2+h*(x2-y2);
    if x2<0.00001
        x2=0;
    end
    if x2>1
        x2=1;
    end
    x3=x3+h*(x3-y3);
    if x3<0.00001
        x3=0;
    end
    x4=1-x1-x2-x3;
    if x4<0.00001
        x4=0;
    end
end
DATA2=[xa,xb,xc,xd];
DATAT=[DATA1;DATA2];
%ELABORACIÓN DE LOS DIAGRAMAS MCR Y CPM
%Elaboración de diagrama
fig = quatplot();
hold on;
% Puntos y trayectoria de MCR
scatter3(DATA1(:,1,1), DATA1(:,2,1), DATA1(:,4,1), 50, 'filled', 'MarkerFaceColor', 'r');
for k=1:nu_
    plot3(DATA1(:,1,k), DATA1(:,2,k), DATA1(:,4,k), 'r-', 'LineWidth', 1.5);
end

```

```

scatter3(DATA2(:,1,1), DATA2(:,2,1), DATA2(:,4,1), 50, 'filled', 'MarkerFaceColor', 'r');
for k=1:nu_
plot3(DATA2(:,1,k), DATA2(:,2,k), DATA2(:,4,k), 'b-', 'LineWidth', 1.5);
end

% Etiquetas y estilo
quatlable('Etanol', 'Agua', 'Butanol', 'Acético', fig);
legend('Trayectoria de composición', 'Location', 'best');
title('Diagrama ternario (Etanol-Agua-Acético) con Butanol fijo');
grid on;
hold off;

%%
X1=zeros(120,1,nu_);
X2=zeros(120,1,nu_);
for j=1:nu_
    TABLA=DATAT(:,j);
    for i=1:120
        x1=TABLA(i,1);
        x2=TABLA(i,2);
        x3=TABLA(i,3);
        x4=TABLA(i,4);
        %TRANSFORMACIÓN PARA CPM
        X1(i,1,j)=(x1+x3)/(1+x4);
        X2(i,1,j)=(x2+x3)/(1+x4);
    end
end

figure(2)
hold on
grid on
axis([0 1 0 1])
title('perfil de curvas');
% --- Añadir etiquetas en las 4 esquinas ---
text(-0.08, -0.08, 'Ac. ACETICO X4', 'VerticalAlignment', 'bottom', 'HorizontalAlignment',
'left');
text(1.09, 0, 'ETANOL X1', 'VerticalAlignment', 'bottom', 'HorizontalAlignment', 'right');
text(-0.05, 1.07, 'AGUA X2', 'VerticalAlignment', 'top', 'HorizontalAlignment', 'left');
text(1.06, 1.06, 'BUTANOL X3', 'VerticalAlignment', 'top', 'HorizontalAlignment', 'right');

% Puntos y trayectoria de CPM
for k=2:nu_
plot(X1(1:60,1,k),X2(1:60,1,k),'r-')
plot(X1(61:120,1,k),X2(61:120,1,k),'b-')
end
hold off

```