

Simulación del tren de separación en el proceso de conversión de metanol a olefinas utilizando el programa de uso libre DWSIM

Sergio Andrés Bonilla Rangel y Eberth Julián Rodríguez Redondo

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Químico

Modalidad trabajo de investigación

Director:

Giovanni Morales Medina

PhD en Ingeniería Química

Universidad Industrial De Santander

Facultad De Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela De Ingeniería Química

Bucaramanga

2026

### **Dedicatoria**

*Dios, te dedico este logro, que toda la gloria sea para ti.*

*Segundo, les dedico este logro a mis padres, especialmente a mi madre que en los momentos más difíciles de su vida siempre estuvo para mí. A mi familia y allegados. Siempre me dieron el ánimo que necesitaba, mil gracias a todos.*

*A los profesores y compañeros que hicieron parte de mi formación.*

*Lo dedico también a los amantes de la ingeniería química, la simulación, la lectura y la academia, que valgan todas horas, días, meses, años, que tomó concretarlo, da satisfacción cumplir con el deber.*

*Sergio Andrés Bonilla Rangel*

*Dedico este logro a mi madre, quien me ve desde el cielo; a mi padre, por nunca dejar de confiar en mí; y a mi familia y amigos, quienes, con cada palabra y cada pregunta relacionada con mis estudios, aportaron un granito de apoyo en este camino.*

*Eberth Julián Rodríguez Redondo*

### **Agradecimientos**

*Gracias Dios, siempre me acompañaste en este largo proceso, surgieron obstáculos que ponían a prueba mi perseverancia y dedicación, me diste la certeza de cumplirlo cuando pensé no poder alcanzarlo, cada desafío construyó lo que soy, de no ser por Ti nada sería.*

*Agradezco a Dios por la salud de mi madre y mi padre; gracias Má por esperar y aguantar tanto, por tu amor y fortaleza, por tus enseñanzas, tus oraciones y bendiciones, eres la más fuerte de esta batalla. A mi padre, gracias por su apoyo incondicional y creer en mí, su corazón es muy grande. Estuvieron cuando pensé renunciar a todo. Gracias por todo.*

*Le doy gracias al profesor Giovanni por su paciencia y comprensión, su compromiso con la academia permitió concretar este logro, sus recomendaciones y consejos aportaron a mi crecimiento personal y profesional. Dios lo bendiga siempre. Me disculpo por la tardanza. También gracias a la secretaria Lina, por su dedicación y disposición, su acompañamiento ha sido vital para la culminación de este proyecto, su gestión y orientación en tramites me salvó muchas veces. Que Dios me la siga bendiciendo. A todos los conocidos gracias por el aguante. A esta alma mater le agradezco por permitirme gozar de tantos momentos, beneficios y espacios que aprecio, con gusto puedo decir que me gocé la UIS, además de poder alcanzar esta meta.*

*Sergio Andrés Bonilla Rangel*

*Agradezco a Dios por las enseñanzas que me dejó este proceso: por enseñarme a no desfallecer y a mantener la perseverancia y la dedicación en todo lo que hago.*

*A mi madre y a mi padre, por su amor y por ser siempre mi refugio. A mi madre le dedico este logro; sé que me ve desde el cielo y que está feliz por esta etapa que he culminado. A mi padre, por ser un referente, un ejemplo a seguir y por su apoyo incondicional.*

*A mis hermanos, por estar siempre presentes, y a mi tía Blanca, por su constante preocupación y  
cariño.*

*Agradezco al profesor Giovanni por su apoyo y paciencia, y a la secretaria Lina por su gran  
actitud y disposición para ayudar siempre.*

*A cada persona que conocí en este camino académico, porque todos y cada uno aportaron a lo  
que hoy soy como persona y como profesional.*

*Finalmente, agradezco a mi alma mater, que me vio crecer y fue mi segundo hogar durante  
varios años. Gracias.*

*Eberth Julián Rodríguez Redondo.*

**Tabla de contenido:**

	<b>Pag</b>
Introducción .....	12
1 Objetivos .....	14
1.1 Objetivo General .....	14
1.2 Objetivos específicos .....	14
2 Marco teórico .....	15
2.1 Olefinas .....	15
2.2 Proceso de conversión de metanol a olefinas (MTO) .....	15
2.3 DWSIM .....	17
3 Estado del arte .....	18
4 Metodología .....	19
4.1 Fase I: Desarrollo del caso base en DWSIM .....	19
4.2 Fase II: Validación del modelo .....	21
4.3 Fase III: Análisis de sensibilidad .....	21
5 Resultados .....	22
5.1 Simulación del tren de separación .....	22
5.1.1 Perfil de temperatura y presión .....	24
5.1.2 Perfil de composición molar .....	25
5.2 Validación y comparación de las variables de respuesta .....	26
5.3 Análisis de sensibilidad .....	28

Conclusiones .....	32
Recomendaciones .....	33
Referencias Bibliográficas .....	34
Apéndices.....	36

**Lista de Tablas**

<b>Tabla 1</b> <i>Propiedades de la corriente de Alimentación DCOLI</i> .....	<b>20</b>
<b>Tabla 2</b> <i>Parámetros de operación para cada Columna de destilación</i> .....	<b>21</b>
<b>Tabla 3</b> <i>Cargas energéticas para cada columna</i> .....	<b>23</b>
<b>Tabla 4</b> <i>Condiciones de entrada y salida del proceso</i> .....	<b>23</b>
<b>Tabla 5</b> <i>Porcentaje de Error Relativo del consumo energético ASPEN vs DWSIM</i> .....	<b>27</b>
<b>Tabla 6</b> <i>Porcentaje de Error Relativo del Flujo molar de las corrientes de salida ASPEN vs DWSIM</i> .....	<b>27</b>
<b>Tabla 7</b> <i>Porcentaje de Error Relativo de la Fracción molar de los compuestos de interés en las corrientes de salida ASPEN vs DWSIM</i> .....	<b>28</b>
<b>Tabla 8</b> <i>Variable sensibilizada. Temperatura de la corriente de alimentación</i> .....	<b>29</b>
<b>Tabla 9</b> <i>Variable sensibilizada. Presión de la corriente de alimentación</i> .....	<b>30</b>
<b>Tabla 10</b> <i>Variable sensibilizada. Flujo molar de alimentación</i> .....	<b>31</b>

**Lista de Figuras**

<b>Figura 1</b> <i>Diagrama de bloques para el proceso MTO</i> .....	<b>16</b>
<b>Figura 2</b> <i>Diagrama PFD, segunda etapa de separación del proceso MTO</i> .....	<b>17</b>
<b>Figura 3</b> <i>Convergencia del tren de separación codificado en el programa DWSIM</i> .....	<b>22</b>
<b>Figura 4</b> <i>Perfiles de temperatura y presión con respecto al número de etapas para cada torre de destilación</i> .....	<b>24</b>
<b>Figura 5</b> <i>Perfiles de composición molar en cada una de las columnas</i> .....	<b>25</b>

**Lista de Apéndices:**

<b>Apéndice A.</b> <i>Proceso de selección de condiciones operaciones del caso base en ASPEN Plus</i> .	<b>36</b>
<b>Apéndice B.</b> <i>Reconocimiento exploratorio del interfaz y configuración en DWSIM</i> .....	<b>39</b>
<b>Apéndice C.</b> <i>Setting del paquete termodinámico de propiedades Peng-Robinson (PR)</i> .....	<b>43</b>
<b>Apéndice D.</b> <i>Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL1</i> .....	<b>46</b>
<b>Apéndice E.</b> <i>Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL2</i> .....	<b>48</b>
<b>Apéndice F.</b> <i>Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL3</i> .....	<b>50</b>
<b>Apéndice G.</b> <i>Ventanas de resultados en DWSIM</i> .....	<b>52</b>

## Resumen

**Título:** Simulación del tren de separación en el proceso de conversión de metanol a olefinas utilizando el programa de uso libre DWSIM.<sup>1</sup>

**Autores:** Sergio Andrés Bonilla Rangel, Eberth Julián Rodríguez Redondo<sup>2</sup>

**Palabras Clave:** DWSIM, metanol a olefinas (MTO), simulación de procesos, tren de separación, destilación, convergencia.

**Descripción:** El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar y analizar la simulación de la segunda sección de separación del proceso de conversión de metanol a olefinas (MTO) utilizando el simulador de procesos de uso libre DWSIM. El estudio evalúa el comportamiento operacional del sistema de purificación posterior a la reacción catalítica, optimizando condiciones de operación y verificando la viabilidad técnica mediante modelado y simulación computacional, contrastando los resultados obtenidos con datos reportados en ASPEN.

La metodología se estructuró en fases que incluyeron revisión bibliográfica del proceso MTO, selección del paquete termodinámico, configuración del diagrama de flujo, parametrización de equipos de separación y validación mediante balances de materia y energía. Se realizaron corridas de simulación para analizar variables críticas como temperatura, presión y eficiencia de separación. Los resultados demostraron que DWSIM representa adecuadamente el comportamiento del tren de separación, logrando recuperaciones eficientes de olefinas ligeras y remoción de subproductos. Se consideraron parámetros reportados en la literatura, como relación de reflujo, número de etapas y plato de alimentación, obteniéndose un modelo base convergente con errores menores al 2 % frente a variables de respuesta. Se concluye que la simulación en DWSIM constituye una herramienta confiable para el análisis y optimización preliminar de procesos petroquímicos basados en tecnología MTO.

---

<sup>1</sup> Trabajo de grado

<sup>2</sup> Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Giovanni Morales Medina, PhD en Ingeniería Química.

### Abstract

**Title:** Simulation of the separation train in the methanol-to-olefins conversion process using the Open-Source software DWSIM.<sup>+</sup>

**Authors:** Sergio Andrés Bonilla Rangel, Eberth Julián Rodríguez Redondo<sup>++</sup>

**Key words:** DWSIM, Methanol-to-Olefin (MTO), Process simulation, Separation train, Process engineering, Distillation, Convergence.

**Description:** This work aims to develop and analyze the simulation of the second separation section of the Methanol-to-Olefins (MTO) conversion process using the open-source process simulator DWSIM. The study evaluates the operational behavior of the purification system downstream of the catalytic reactor, optimizing operating conditions and verifying technical feasibility through computational modeling and simulation, while comparing the obtained results with data reported in ASPEN.

The methodology was structured in sequential stages including literature review of the MTO process, thermodynamic package selection, process flow diagram configuration, separation equipment parameterization, and validation through mass and energy balances. Simulation runs were performed to analyze critical variables such as temperature, pressure, and separation efficiency. Results showed that DWSIM reliably represents the separation train performance, achieving efficient recovery of light olefins and effective removal of by-products. Literature-based parameters such as reflux ratio, number of stages, and feed tray location were considered, leading to a converged base model with errors below 2% in response variables. It is concluded that DWSIM simulation is a reliable tool for preliminary analysis and optimization of petrochemical processes based on MTO technology.

---

<sup>+</sup> Degree work

<sup>++</sup> Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Giovanni Morales Medina, PhD in Chemical Engineering

## Introducción

La conversión de metanol a olefinas (MTO, *methanol to olefines*) es un proceso clave en la industria petroquímica, dado que permite la obtención de productos esenciales como el etileno y el propileno, ampliamente utilizados en la fabricación de plásticos, solventes y otros compuestos químicos de alto valor comercial (Yu & Chien, 2016). La creciente demanda global de estos petroquímicos ha impulsado la necesidad de optimizar los procesos de producción, en la búsqueda de mejorar su eficiencia y reducir su impacto ambiental. Según Gaffney et al. (2021), la producción de etileno y propileno ha mostrado un crecimiento sostenido, impulsado por exigencias del mercado y regulaciones ambientales cada vez más estrictas, que demandan procesos más sostenibles y eficientes.

Así mismo uno de los principales desafíos en la implementación del proceso MTO es la complejidad de las reacciones involucradas y la necesidad de un tren de separación adecuado para la purificación de los productos obtenidos, aquí los efectos de las condiciones de alimentación y los parámetros operacionales del diseño juegan un papel clave a la hora de optimizar el sistema propuesto debido a que el rendimiento del tren de separación depende de múltiples variables operativas, como la temperatura, la presión y la relación de reflujo. Según Detchusananard et al. (2022), la optimización de estos parámetros puede reducir significativamente el consumo energético del proceso, y a su vez mejorar su viabilidad económica y sostenibilidad ambiental.

Previamente los diseños desarrollados por Yu & Chien (2016), y optimizado por Moghaddam (2022), han abordado la simulación de este proceso y utilizaron softwares comerciales como ASPEN plus y Aspen HYSYS, identificaron oportunidades de mejora en la separación de los productos finales, sin embargo, hasta el momento no se han reportado

simulaciones del tren de separación del proceso MTO que empleen software de código abierto o de uso libre como DWSIM (DWSIM.org).

El propósito de este trabajo de grado evaluar la viabilidad de DWSIM como una alternativa para la simulación del tren de separación del proceso MTO, comparar sus resultados con los reportados en la literatura. DWSIM presenta ventajas significativas, como la licencia de libre uso y el acceso a una comunidad de usuarios a nivel global, lo que lo convierte en una herramienta potencialmente accesible y eficiente para la industria y la academia.

De acuerdo a lo anterior, este estudio radica su justificación en la importancia de validar herramientas de simulación accesibles que permitan el diseño y optimización de procesos sin incurrir en elevados costos de software. Esto puede beneficiar tanto a instituciones académicas como a pequeñas y medianas empresas que no disponen de acceso a software comercial costoso.

La pregunta de investigación que guía este estudio es, ¿cuál es el nivel de precisión de una simulación desarrollada en DWSIM para el tren de separación del proceso MTO en comparación con reportes de literatura?

## **1 Objetivos**

### **1.1 Objetivo General**

Evaluar los resultados del programa de uso libre DWSIM en una simulación del tren de separación del proceso de conversión de metanol a olefinas, respecto a los resultados reportados en literatura obtenidos con un programa comercial.

### **1.2 Objetivos específicos**

Configurar en el programa DWSIM una simulación en estado estacionario para el tren de separación del proceso de conversión de metanol a olefinas, con base en las operaciones unitarias especificadas en reportes de literatura, estableciendo un caso base de comparación.

Validar los desempeños de la simulación en DWSIM, por comparación de los rangos de consumos energéticos y desempeños de separación con los reportados por simulaciones en un programa comercial.

Analizar las respuestas de la simulación codificada en DWSIM, aplicando un análisis de sensibilidad a las variables de entrada, manteniendo los valores de consumos energéticos y desempeños de separación estables.

## 2 Marco teórico

### 2.1 Olefinas

Son denominadas generalmente alquenos o hidrocarburos insaturados caracterizados por la presencia de al menos un doble enlace entre átomos de carbono. Estas son producidas a partir del petróleo y gas natural. Dentro del ámbito industrial, el etileno y el propileno destacan como dos de las olefinas más relevantes, debido a su alta demanda en la producción de plásticos, solventes y otros productos petroquímicos de gran valor comercial (Dimian & Bildea, 2018). En 2016, la producción global de etileno y propileno superaron las 150 y 100 toneladas por año respectivamente. Los principales productores de olefinas ligeras son China, Estados Unidos, Arabia Saudita, Corea del sur e India (Dimian et al., 2019)

### 2.2 Proceso de conversión de metanol a olefinas (MTO)

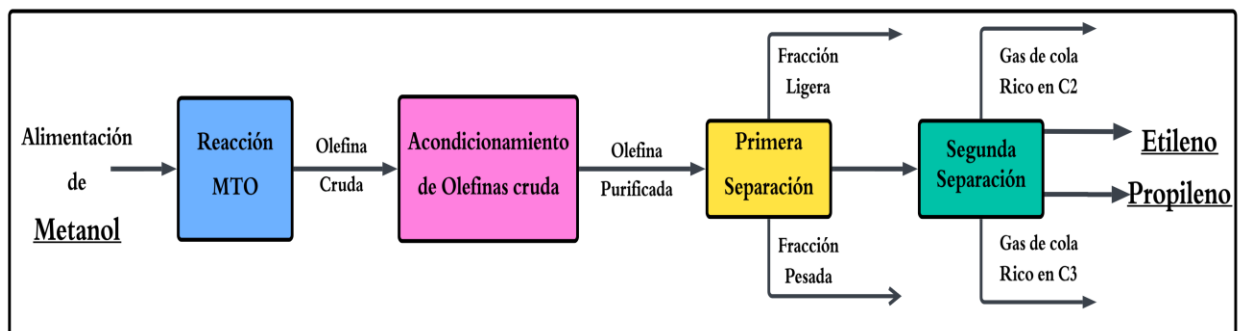
Actualmente se han desarrollado nuevas tecnologías basadas en metanol, como lo son MTO (methanol-to-olefins) y MTP (methanol-to-propylene), donde el metanol se convierte en un recurso limpio y disponible mediante el uso de materias primas renovables como biogás y biomasa (Dimian & Bildea, 2018). MTO representa una alternativa tecnológica eficiente para la obtención de estos compuestos. En este proceso, el metanol es transformado en olefinas ligeras mediante una serie de reacciones catalíticas de deshidratación, polimerización y fragmentación térmica (Ortiz-Espinoza et al., 2015). Su implementación ha ganado relevancia en la industria química como una estrategia para diversificar las fuentes de producción de olefinas y disminuir la dependencia del petróleo como materia prima (Arvidsson et al., 2016).

En el proceso MTO se requiere una secuencia integrada de cuatro etapas principales: reacción, acondicionamiento, primera separación y segunda separación como lo muestra la Figura 1. Inicialmente, el metanol es transformado catalíticamente en olefinas ligeras dentro del reactor

de lecho fluidizado con catalizador poroso DMTO, generando una corriente compleja compuesta principalmente por etileno, propileno, parafinas ligeras, hidrocarburos C4+ y pequeñas cantidades de subproductos propuesto por Ying et al (2015). La corriente de salida del reactor es enfriada y enviada a dos columnas de enfriamiento, donde se inicia la separación de los productos. Posteriormente, esta corriente es sometida a una etapa de acondicionamiento o purificación primaria, donde se eliminan impurezas y se ajustan las condiciones térmicas y de fase para facilitar la separación posterior. En esta etapa, la corriente se divide en tres fracciones principales. La fracción que contiene etileno, etano, propileno y propano es la de mayor interés en este estudio, dado que debe ser sometida a un proceso de purificación adicional (Yu & Chien, 2016).

**Figura 1**

*Diagrama de bloques para el proceso MTO.*

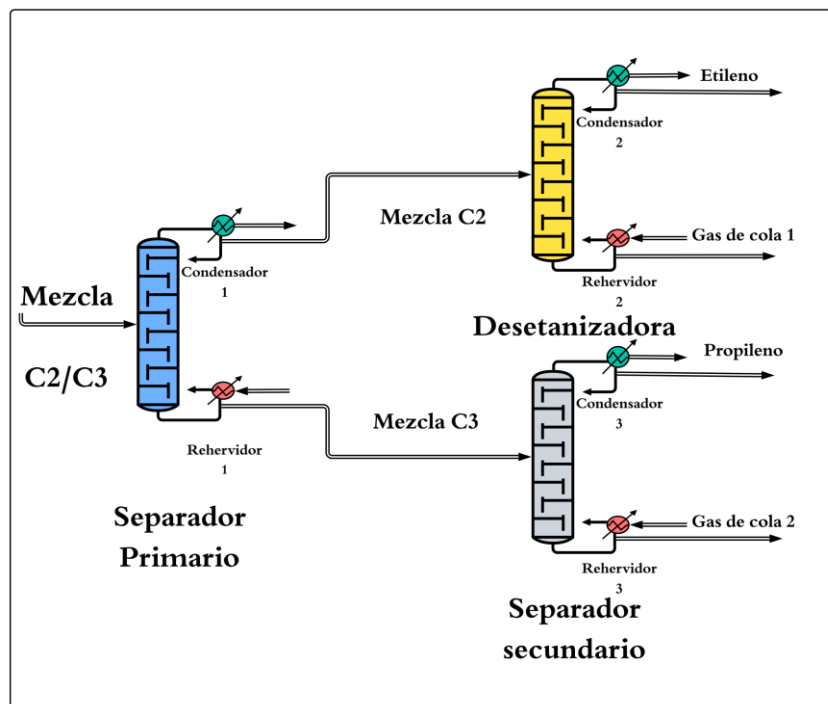


*Nota.* Tomado de (Yu & Chien, 2016).

En este sentido, la Figura 2 ilustra la segunda etapa de separación consiste en tres columnas: un separador primario, una desetanizadora y un separador secundario. En el separador primario (*C2 Stripper*), el flujo se divide en dos corrientes: la corriente superior, que contiene etileno y etano, es enviada a la desetanizadora (*Deethanizer*) para su purificación, mientras que la corriente inferior, compuesta por propileno y propano, es dirigida al separador secundario (*C3 Stripper*). En esta sección, se logra la obtención de etileno y propileno con alta pureza (Dimian et al., 2019).

**Figura 2**

Diagrama PFD, segunda etapa de separación del proceso MTO.



Nota. Adaptado de (Moghaddam,2022).

### 2.3 DWSIM

Es un software de simulación de procesos químicos de código abierto compatible con el estándar CAPE-OPEN, el cual permite la interoperabilidad de soluciones, esto posibilita combinar interfaces de modelamiento de softwares o programas entre sí; al contar con una interfaz gráfica o superficie de contacto completa y fácil de usar lo hace muy versátil e intuitivo, además puede ejecutarse en cualquier sistema operativo con pocos requerimientos de hardware (IQR Ingeniería Química, 2022).

Este programa ofrece muchas funciones que antes estaban disponibles exclusivamente en simuladores comerciales; tales como, software multiplataformas, simulaciones y equipos de operaciones unitarias en estado estacionario y dinámico, modelos avanzados de paquetes termodinámicos, interfaz de Excel, automatización de API, termodinámica autónoma, análisis de

procesos y extras (DWSIM.org). Ampliamente reconocido en el ámbito académico y profesional como una herramienta que permite la modelización de procesos químicos basados en ecuaciones de balance de materia y energía, proporcionando una alternativa accesible frente a softwares comerciales como Aspen HYSYS, CHEMCAD o Pipephase (IQR Ingeniería Química, 2022).

### 3 Estado del arte

En la última década, se han desarrollado diversas investigaciones enfocadas en optimizar la producción de olefinas a partir de metanol. Para ello Najafabadi et al (2012) desarrollaron un modelo cinético para el proceso MTO basados en datos obtenidos de un micro reactor catalítico utilizando una red de reacciones adecuada. Al comparar los datos experimentales y los valores predichos por el modelo propuesto mostró una buena concordancia entre ambos esto permitió optimizar el algoritmo genérico y presentar las condiciones operativas óptimas para lograr la máxima producción de etileno y propileno.

En particular, Yu & Chien (2016) en el ámbito de la simulación, diseñaron y optimizaron modelos en estado estacionario del proceso MTO por medio de la herramienta ASPEN Plus, identificaron condiciones óptimas de operación para la purificación y selectividad de etileno y propileno lo que ofrece ventajas operativas frente al método tradicional de producción de olefinas, además de proponer un diagrama global de flujo del proceso más económicamente competitivo.

De mismo modo, Moghaddam (2022) simuló y optimizó en Aspen HYSYS el uso de un diseño experimental para mejorar la eficiencia del tren de separación en el proceso MTO, esto demostró qué ajustes en las condiciones operativas pueden incrementar significativamente la recuperación de productos deseados. Por otro lado, Yang et al. (2024) implementaron estrategias de optimización multiobjetivo basadas en aprendizaje automático para el sistema de separación de olefinas ligeras. Sus hallazgos indicaron que la incorporación de modelos predictivos puede

mejorar la eficiencia de separación y reducir el consumo energético en comparación con enfoques tradicionales.

No obstante, hasta la fecha, no se han reportado estudios comparativos entre ASPEN Plus y DWSIM en el contexto del tren de separación del proceso MTO. El presente trabajo tuvo en cuenta las investigaciones previas para implementar el uso del software de código abierto DWSIM para la simulación del tren de separación en el proceso MTO. En este sentido, se pretende evaluar la precisión de sus resultados en contraste a los reportados con ASPEN Plus.

## 4 Metodología

Para dar cumplimiento a los objetivos planteados, se desarrolló una metodología de enfoque cuantitativo basada en la simulación de procesos, estructurada en tres fases principales: (i) configuración del caso base en DWSIM, (ii) validación del modelo y (iii) análisis de sensibilidad.

### 4.1 Fase I: Desarrollo del caso base en DWSIM

A partir de la revisión bibliográfica, se definió el caso base representativo del tren de separación del proceso MTO diseñado por Yu & Chien (2016), se tomó como referencia las propiedades de la mezcla de alimentación y condiciones operacionales del sistema reportadas en la configuración del diagrama de flujo para la separación de olefinas ligeras simulado en ASPEN Plus (ver *Apéndice A*).

Basados en esta información, se implementó la simulación en estado estacionario en DWSIM V9.0.4; inicialmente se configuró el *setting* de requerimientos específicos iniciales del software y el paquete termodinámico de propiedades de operación Peng-Robinson ya que es adecuado para sistemas de hidrocarburos ligeros que presenta fase líquida y vapor simultáneamente (ver *Apéndice B* y *Apéndice C*); los valores de las propiedades de la mezcla de

alimentación como la presión, temperatura, composiciones y flujo molar se registran en la *Tabla 1*, mientras que los parámetros de operación del diseño de las columnas (número de etapas, plato de alimentación, etc.) se plantean en la *Tabla 2*; para dar un mejor orden de ideas, los nombres y abreviaciones de las corrientes de material, así como los deberes del condensador ( $Q_c$ ) y servicios del rehervidor ( $Q_r$ ) fueron llamadas igual que en la literatura.

**Tabla 1**

*Propiedades de la corriente de Alimentación DCOL1.*

Condiciones de la corriente	Mezcla	Unidad
Temperatura	13,4	°C
Presión	30,1	bar
Flujo másico	8871,46	kg/h
Flujo molar	259,8	kmol/h
Flujo volumétrico	7,57	m <sup>3</sup> /h
Fracción molar (Mezcla) / Etano	0,016	
Fracción molar (Mezcla) / Propano	0,029	
Fracción molar (Mezcla) / Etileno	0,556	
Fracción molar (Mezcla) / Propileno	0,399	

Adicionalmente, las columnas de destilación *C2 Stripper*, *Deethanizer* y *C3 Stripper* fueron nombradas DCOL1, DCOL2 y DCOL3 respectivamente; se seleccionó el *Column Solver*: Naphthali-Sandholm para DCOL1 mientras que DCOL2 y DCOL3 requirieron Wang-Henke y Modified Wang-Henke respectivamente; a partir de la relación de reflujo sugerido por Moghaddam (2022), donde él propone un rango optimizado de 1,2 a 1,5, se eligió para la columna 1 el valor de *reflux ratio* igual a 1,35 y los demás valores seleccionados para las otras dos columnas fueron ajustados rigurosamente para concordar con los resultados logrados por Yu & Chien (2016), debido a que ellos no aportan estos detalles, el resto de especificaciones necesarias para configurar la simulación se encuentran detalladas en los *Apéndice D*, *Apéndice E* y *Apéndice F*. Al cerrar los balances de masa y energía se ejecutó la simulación para validar la convergencia.

**Tabla 2**

*Parámetros de operación para cada Columna de destilación.*

Variables de Operación	DCOL1	DCOL2	DCOL3	Unidad
Número de etapas	38	60	195	
Plato de Alimentación	17	30	135	
Caída de presión de la columna	0	0	0	bar
Valor específico del condensador :Reflux Ratio:	1,35	2,6	11,3	
Valor específico del rehervidor :Product Molar Flow:	110,5	4,9	8,2	kmol/h

#### 4.2 Fase II: Validación del modelo

Una vez obtenido el caso base convergente, se realizó la validación del modelo mediante la comparación de los resultados obtenidos en DWSIM con los datos aportados en la literatura. Para ello, se calculó el error relativo porcentual de las variables de respuesta, como requerimientos energéticos en condensadores y rehervidores, flujos molares y fracción molar del compuesto mayoritario en los flujos de salida del proceso, y así cuantificar las diferencias entre ambos simuladores.

#### 4.3 Fase III: Análisis de sensibilidad

Con el modelo validado, se realizó un análisis de sensibilidad con el fin de evaluar de manera individual el efecto de temperatura, presión y flujo molar en la alimentación frente a las condiciones de operación y desempeño del tren de separación. Se generaron múltiples escenarios de simulación, cuyos resultados fueron organizados en tablas que incluyen variables de salida como composición molar del compuesto de interés, flujo de energía y requerimientos energéticos de cada torre. El análisis permitió identificar la influencia de cada variable sobre la eficiencia de separación y el consumo energético del proceso.

## 5 Resultados

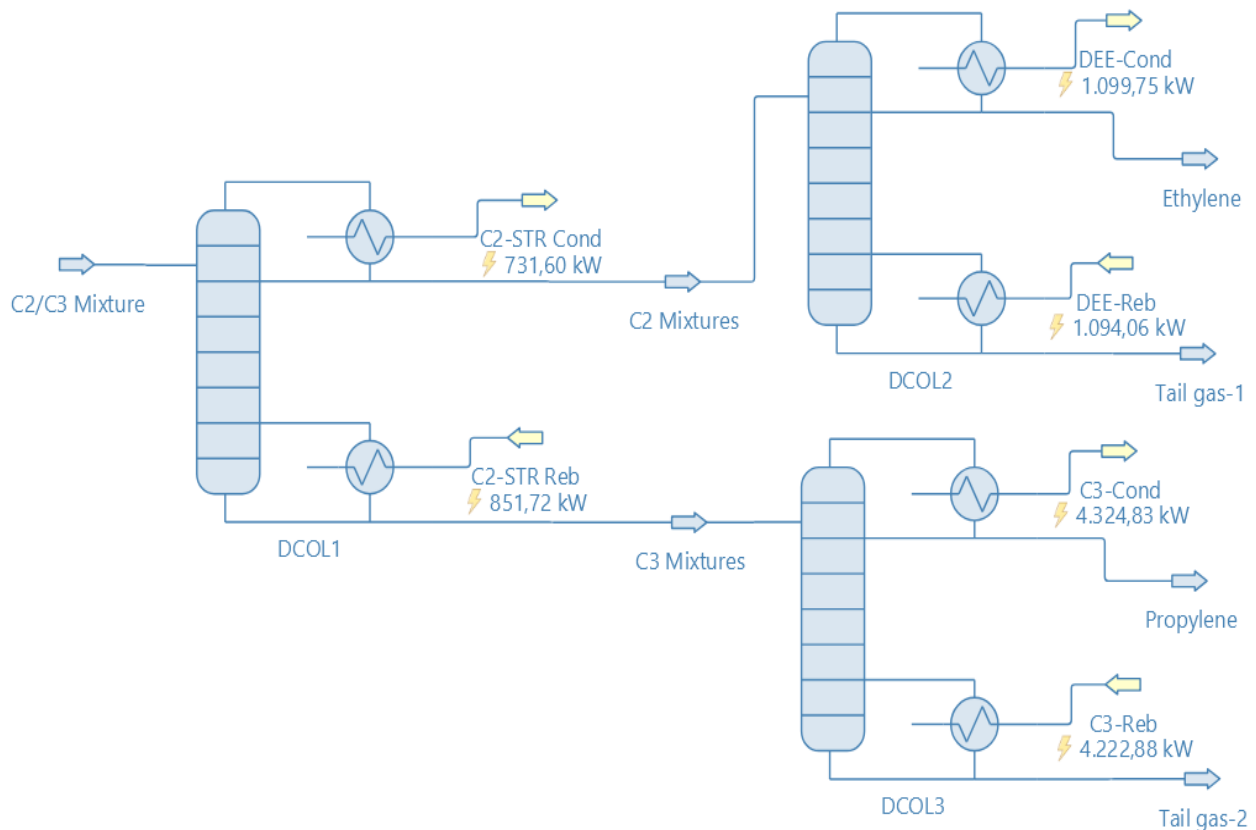
Después del proceso de familiarización y exploración de la interfaz del programa, se simuló de manera exitosa la segunda sección de separación del proceso MTO y los datos representativos alcanzados por DWSIM son abordados en este apartado; la tendencia de los perfiles graficados, los porcentajes de error y las variables sensibilizadas se explican a continuación:

### 5.1 Simulación del tren de separación

La Figura 3 representa la simulación de la segunda sección del proceso MTO codificada en DWSIM 9.0.4v, esta figura demuestra que se alcanzó la convergencia en la simulación, así como los requerimientos energéticos en los condensadores y rehedidores de cada columna, ordenados en la Tabla 3.

#### Figura 3

*Convergencia del tren de separación codificado en el programa DWSIM.*



**Tabla 3**

*Cargas energéticas para cada columna.*

<b>Objeto</b>		<b>DCOL1</b>	<b>DCOL2</b>	<b>DCOL3</b>	<b>Unidad</b>
Duty del condensador	Qc	731,6	1099,7	4324,9	kW
Duty de recalentador	Qr	-851,7	-1094,1	-4222,9	kW

Por su parte la **Tabla 4** organiza los valores de las propiedades de la corriente de entrada junto a los calculados en las corrientes de salida del proceso como temperatura, presión, flujo molar y composiciones molares de la mezcla. A partir de esta tabla es posible constatar que la simulación predice una mayor pureza de etileno (99,44% molar) en la corriente de tope de DCOL2 o flujo de interés *Ethylene*, en tanto que en el fondo de la columna 2 (corriente *Tail gas 1*) sale mezcla de etano (67,4% molar) y etileno (16,6% molar). Simultáneamente la corriente de fondo de la columna 1 es separada en DCOL3, de ella sale la corriente *Propylene* por la cima con producto interés propileno (98,76% molar) y una corriente de fondo (*Tail gas 2*) con mezcla de propano (77,44 % molar) y propileno (22,55% molar).

**Tabla 4**

*Condiciones de entrada y salida del proceso.*

<b>Corriente</b>	<b>Temperatura</b> °C	<b>Presión</b> bar	<b>Flujo molar</b> kmol/h	<b>Fracción Molar (Mezcla) / Etano</b> [C2H6]	<b>Fracción Molar (Mezcla) / Propano</b> [C3H8]	<b>Fracción Molar (Mezcla) / Etileno</b> [C2H4]	<b>Fracción Molar (Mezcla) / Propileno</b> [C3H6]
<b>C2/C3 Mixture</b>	13,4	30,1	259,8	0,016	0,029	0,556	0,399
<b>C2 Mixtures</b>	-14,0	29	149,3	0,027	0,001	<b>0,967</b>	0,005
<b>C3 Mixtures</b>	66,8	29	110,5	0,001	0,067	0,001	<b>0,931</b>
<b>Ethylene</b>	-16,0	28	144,4	0,005	0,0	<b>0,994</b>	0,001
<b>Tail gas 1</b>	8,3	28	4,9	<b>0,674</b>	0,001	0,166	0,159
<b>Propylene</b>	43,6	18	102,3	0,001	0,011	0,0	<b>0,988</b>
<b>Tail gas 2</b>	49,4	18	8,2	0,0	<b>0,774</b>	0,001	0,225

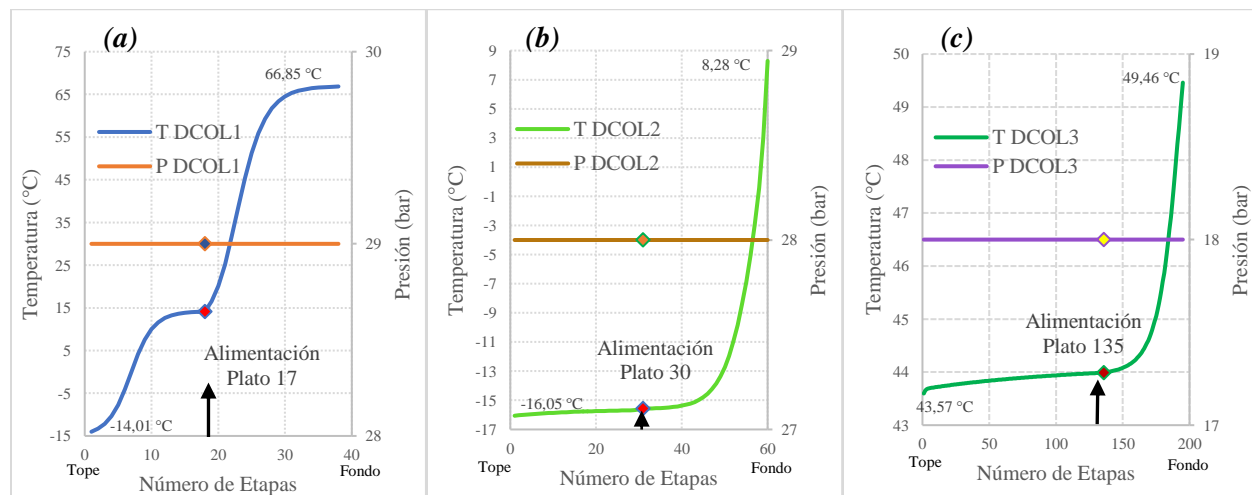
### 5.1.1 Perfil de temperatura y presión

Al graficar los perfiles de temperatura y presión con respecto al número de etapas en cada una de las columnas es posible afirmar que la tendencia de la temperatura es la esperada para las torres, perfil ascendente mientras se desciende en la torre (tope más frío que el fondo) como se muestra en la Figura 4.

Según la figura 4(a) la columna DCOL1 evidencia un cambio súbito de tendencia en el plato 17 ocasionado por el ingreso de la alimentación a esta; antes y después de este punto el perfil refleja una tendencia semi convexa ascendente. Para la figura 4(b) correspondiente al perfil de DCOL2 no se presenta esta particularidad, desde el tope hasta la alimentación (plato 30) tiende a mantenerse constante, varía muy poco (de  $-16,05\text{ }^{\circ}\text{C}$  a  $-15,6\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) a lo largo de este tramo y cambia de tendencia a convexa ascendente desde la alimentación hasta el fondo. La figura 4(c) presenta el perfil de DCOL3, el cual posee una tendencia logarítmica desde el tope hasta la etapa de alimentación (plato 135); en el siguiente régimen la tendencia es semi convexa ascendente desde la etapa de alimentación hasta el fondo de la torre.

#### Figura 4

*Perfiles de temperatura y presión con respecto al número de etapas para cada torre de destilación.*



*Nota. (a) C2-STR (DCOL1). (b) DEE (DCOL2). (c) C3-STR (DCOL3).*

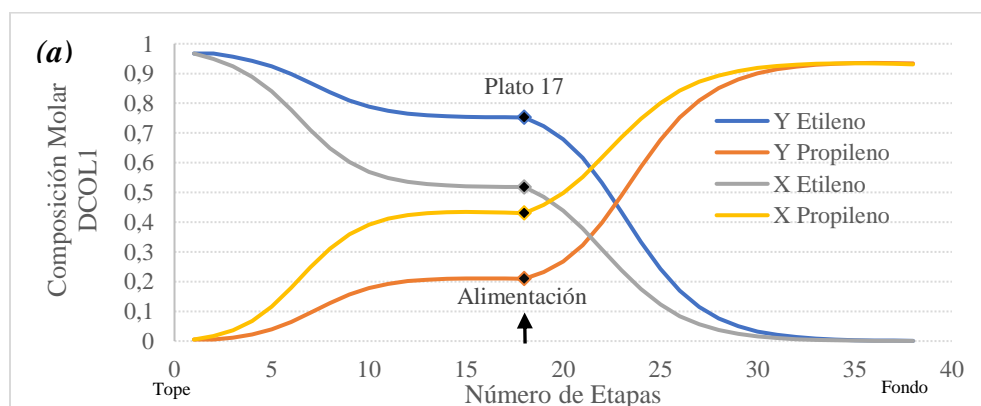
Conjuntamente al perfil de temperatura se integra el perfil de presión, donde la presión se mantiene constante o sin caídas de presión a lo largo de los platos de cada torre; la torre 1 opera a 29 (bar) de presión, mientras que la torre 2 y 3 requieren 28 (bar) y 18 (bar) respectivamente.

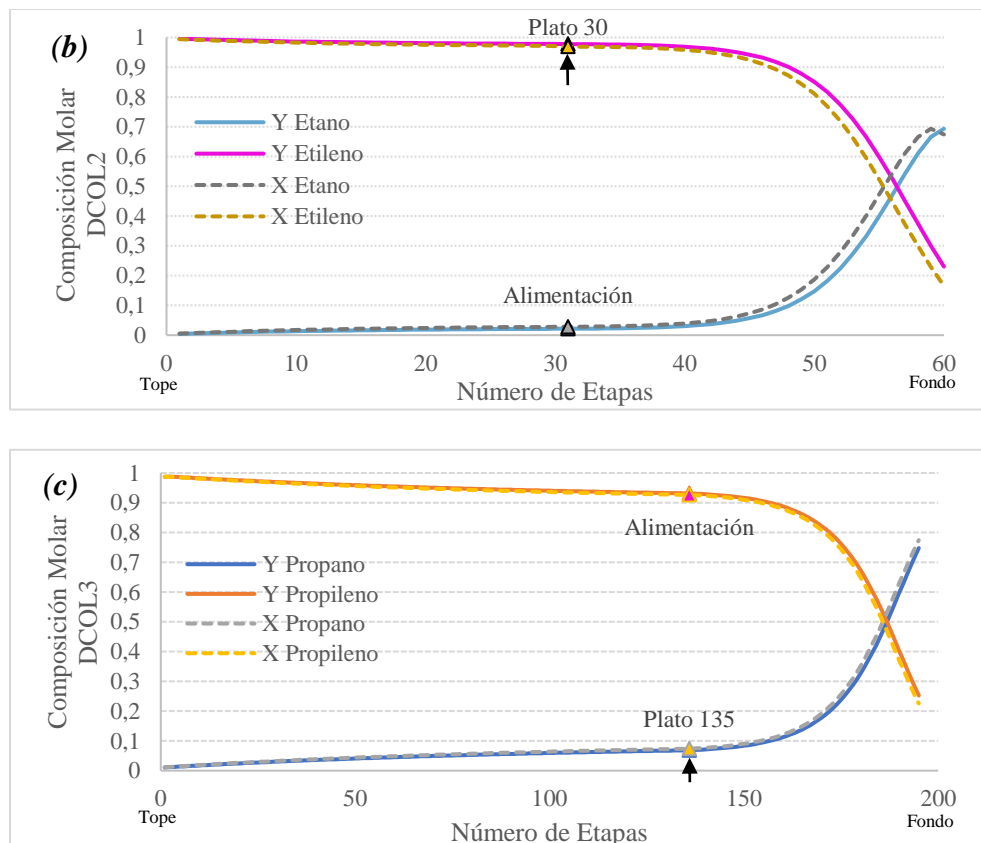
### 5.1.2 Perfil de composición molar

Los perfiles de composición molar tanto líquida ( $x$ ) como vapor ( $y$ ) de los compuestos de interés respecto al número de etapas a lo largo de cada una de las columnas se muestran en la Figura 5. En la columna 1 se obtuvo en mayor proporción una corriente rica en etileno (96,72% molar) en el tope y una corriente rica en propileno (93,1% molar) en el fondo como se aprecia en la figura 5(a). Mientras, en la figura 5(b) se identifica en DCOL2 el compuesto de interés etileno (99,44% molar) en la corriente de tope (*Ethylene*) y la corriente de fondo (*Tail gas 1*) contiene etano (67,4% molar) y etileno (16,57% molar). Así mismo en DCOL3 se evidencia el compuesto de interés propileno (98,76 % molar) en la corriente de tope de igual nombre (*Propylene*) y la corriente *Tail gas 2* es rico en propano (77,44% molar) y propileno (22,55% molar) como se ve en la figura 5(c).

## Figura 5

*Perfiles de composición molar en cada una de las columnas.*





Nota. (a) C2-STR (DCOL1). (b) DEE (DCOL2). (c) C3-STR (DCOL3).

## 5.2 Validación y comparación de las variables de respuesta

Se validó la simulación desarrollada por medio del porcentaje de error estimado a las cargas, molar de las corrientes de salida y fracción molar de los compuestos de interés en las columnas de destilación analizadas y se ordenan de manera independiente en las siguientes tablas, de ellas se interpretó el comportamiento aproximado de cada columna.

Para la comparación de las cargas térmicas aportadas por ASPEN plus y DWSIM en las columnas de destilación analizadas se mostró diferencias que varían dependiendo de la unidad de operación; debido a su diseño y ajustes en la configuración de la simulación conforme a los postulados en la literatura, se buscó equiparar los resultados constatados, de manera simple se calculó el error porcentual entre ambos datos, estos se encuentran condensados en la Tabla 5. Se pueden observar sutiles discrepancias que rondan entre 0,3% y 1,8% de error de replicación de

resultados para cada corriente, esta alta concordancia entre ambos simuladores, con errores inferiores al 2 % en las cargas térmicas indica que, para este proceso de operación, ambos modelos presentan un comportamiento muy similar en la predicción de los requerimientos energéticos.

**Tabla 5**

*Porcentaje de Error Relativo del consumo energético ASPEN vs DWSIM.*

Columna de Destilación		Flujo de Energía	ASPEN	DWSIM	% Error
DCOL1	C2-STR Cond	Qc (kW)	723,84	731,6	1,1
	C2-STR Reb	Qr (kW)	846,44	851,7	0,6
DCOL2	DEE Cond	Qc (kW)	1120,6	1099,7	1,8
	DEE Reb	Qr (kW)	1114,5	1094,1	1,8
DCOL3	C3-Cond	Qc (kW)	4340,8	4324,9	0,3
	C3-Reb	Qr (kW)	4259,6	4222,9	0,8

*Nota.* Los valores en ASPEN (vA) tienen signo contrario a los valores en DWSIM (vD), se da signo positivo a todo y se calcula  $\%E=|(vA-vD)/vA|*100$

También se presentan diferencias porcentuales en los flujos de salida de las torres como se muestran en la Tabla 6, donde el mayor error se presenta en la corriente de fondo de la torre 2 (*Gas tail 1*) con 16,44% de error con respecto a la predicción de ASPEN plus; la diferencia adicional de 0,7 kmol/h predicho por DWSIM frente a los de ASPEN son tomados del flujo de alimentación de la torre 3, ya que el porcentaje contrastado para la corriente de tope *Ethylene* es menor del 0,01%; mientras que el error para *Propylene* y *Gas tail 2* es mayor a 0,5% y 3,5% respectivamente.

**Tabla 6**

*Porcentaje de Error Relativo del Flujo molar de las corrientes de salida ASPEN vs DWSIM.*

Corriente	Flujo molar	ASPEN	DWSIM	% Error
<b>Ethylene</b>	kmol/h	144,39	144,4	0,0
<b>Tail gas 1</b>	kmol/h	4,2	4,9	16,4
<b>Propylene</b>	kmol/h	102,9	102,3	0,6
<b>Tail gas 2</b>	kmol/h	8,5	8,2	3,5

*Nota.* Se calcula  $\%E=|(vA-vD)/vA|*100$

Por otra parte, la Tabla 7 estimó los errores cuantitativos presentes en las corrientes de salida del proceso, según esta tabla DWSIM predijo errores menores al 16%, en las corrientes del fondo de ambas torres, sin embargo, la composición molar de los compuestos de interés de las corrientes de tope manifiesta errores menores del 1%, con lo anterior se intuye que DWSIM es útil para predicciones de análisis semi cuantitativos preliminares.

**Tabla 7**

*Porcentaje de Error relativo de la Fracción molar de los compuestos de interés en las corrientes de salida ASPEN vs DWSIM.*

<b>Corriente</b>	<b>Compuesto</b>	<b>ASPEN</b>	<b>DWSIM</b>	<b>% Error</b>
<b>Ethylene</b>	[C2H4]	0,995	0,9945	0,0
<b>Tail gas 1</b>	[C2H6]	0,803	0,6740	16,1
<b>Propylene</b>	[C3H6]	0,995	0,9876	0,7
<b>Tail gas 2</b>	[C3H8]	0,871	0,7745	11,1

*Nota.* Se calcula  $\%E = |(vA - vD) / vA| * 100$

No se calculó el porcentaje de error a las temperaturas de respuesta para las corrientes de salida de cada torre, ya que la mayor diferencia se presentó en las corrientes de cola y alta similitud en las corrientes de tope como se evidenció anteriormente, esto se debe a que son corrientes de bajo flujo molar y pequeñas variaciones generaron un error porcentual alto.

### **5.3 Análisis de sensibilidad**

Se ejecutó en el software la herramienta de sensibilidad independientemente para la temperatura y presión de alimentación, y de manera manual para el flujo molar; el rango aproximado de temperatura fue +/- 3,3 °C, mientras los límites de la presión fueron 24,08 (bar) y 36,12 (bar), y de 207,84 kmol/h y 311,76 kmol/h de flujo molar de alimentación para el límite inferior y superior respectivamente, estos escenarios se organizan así:

La Tabla 8 aporta qué la influencia de la temperatura del alimento en las variables de respuesta de las corrientes de salida del proceso es mínima, solo muestra una influencia significativa en el deber del rehervidor de la corriente de fondo (*C3 Mixtures*) de la columna 1, sin embargo, la variación en las demás columnas es imperceptible.

**Tabla 8**

*Variable sensibilizada. Temperatura de la corriente de alimentación*

<b>C2/C3 Mixture -Temperatura</b>		<b>Unidad</b>	<b>Límite inferior</b>	<b>Caso Base</b>	<b>Límite superior</b>
		(°C)	10	13,4	16,8
<b>C2 Mixtures -</b>	Temperatura	(°C)	-14,0	-14,0	-13,9
	Fracción molar de Etileno		0,967	0,967	0,967
	Flujo de energía	(kW)	1541,1	1541,4	1542,7
<b>C3 Mixtures -</b>	Temperatura	(°C)	66,87	66,8	66,7
	Fracción molar de Propileno		0,931	0,931	0,930
	Flujo de energía	(kW)	56,9	56,5	54,8
<b>DCOL1 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>731,4</b>	<b>731,6</b>	<b>732,4</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-880,6</b>	<b>-851,7</b>	<b>-807,6</b>
<b>Ethylene -</b>	Temperatura	(°C)	-16,0	-16,0	-16,0
	Fracción molar de Etileno		0,994	0,994	0,994
	Flujo de energía	(kW)	1612,9	1613,1	1613,5
<b>DCOL2 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>1099,8</b>	<b>1099,8</b>	<b>1099,7</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-1094,0</b>	<b>-1094,1</b>	<b>-1094,2</b>
<b>Propylene -</b>	Temperatura	(°C)	43,6	43,6	43,5
	Fracción molar de Propileno		0,988	0,987	0,986
	Flujo de energía	(kW)	158,1	157,7	156,2
<b>DCOL3 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>4324,5</b>	<b>4324,8</b>	<b>4326,5</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-4222,6</b>	<b>-4222,9</b>	<b>-4224,6</b>

Debido a la estabilidad del modelo planteado para el caso base que propuso la caída de presión igual a 0 en cada una de las torres, se demostró que la influencia de la presión en la alimentación solo afecta el duty del rehervidor en el fondo de la columna 1, en tanto es inapreciable en las columnas siguientes donde los resultados no varían para el límite inferior y superior frente al caso base, como se exhiben en la Tabla 9; estos arreglos muestran similitud a los valores de la Tabla 8.

**Tabla 9**

*Variable sensibilizada. Presión de la corriente de alimentación.*

<b>C2/C3 Mixture- Presión</b>		<b>Unidad</b>	<b>Límite inferior</b>	<b>Caso Base</b>	<b>Límite superior</b>
		(bar)	24,08	30,1	36,12
<b>C2 Mixtures -</b>	Temperatura	(C)	-14,0	-14,0	-14,0
	Fracción molar de Etileno		0,967	0,967	0,967
	Flujo de energía	(kW)	1541,8	1541,4	1541,4
<b>C3 Mixtures -</b>	Temperatura	(C)	66,8	66,8	66,8
	Fracción molar de Propileno		0,930	0,931	0,931
	Flujo de energía	(kW)	56,0	56,5	56,6
<b>DCOL1 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>731,8</b>	<b>731,6</b>	<b>731,6</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-832,5</b>	<b>-851,7</b>	<b>-856,6</b>
<b>Ethylene -</b>	Temperatura	(C)	-16,0	-16,0	-16,0
	Fracción molar de Etileno		0,994	0,994	0,994
	Flujo de energía	(kW)	1613,2	1613,1	1613,0
<b>DCOL2 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>1099,7</b>	<b>1099,7</b>	<b>1099,7</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-1094,0</b>	<b>-1094,0</b>	<b>-1094,0</b>
<b>Propylene -</b>	Temperatura	(C)	43,5	43,6	43,6
	Fracción molar de Propileno		0,987	0,987	0,987
	Flujo de energía	(kW)	157,2	157,7	157,8
<b>DCOL3 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>4325,3</b>	<b>4325,0</b>	<b>4324,9</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-4223,4</b>	<b>-4223,0</b>	<b>-4222,9</b>

Por su parte, la Tabla 10 condensa los datos de respuesta del proceso sensibilizados para el flujo molar donde la convergencia de las simulaciones no fue reportada por la herramienta complementaria del programa para el análisis de sensibilidad, este límite mínimo y máximo se estableció con respecto a la convergencia presentada en la simulación por ejecución manual de la misma.

En este escenario se evidenció cuanto influye la cantidad de material suministrado frente a los consumos energéticos y composiciones en las corrientes de interés las cuales revelan proporcionalidad a los rangos establecidos. Siendo este análisis de sensibilidad el que más detalles aportó a la optimización y diseño del proceso.

**Tabla 10**

*Variable sensibilizada. Flujo molar de alimentación.*

<b>C2/C3 Mixture - Flujo molar</b>		<b>Unidad</b>	<b>Límite inferior</b>	<b>Caso Base</b>	<b>Límite superior</b>
		(kmol/h)	207,84	259,8	311,76
<b>C2 Mixtures -</b>	Temperatura	(C)	-14,0	-14,01	-13,29
	Fracción molar de Etileno		0,967	0,967	0,953
	Flujo de energía	(kW)	1233,1	1541,4	1850,1
<b>C3 Mixtures -</b>	Temperatura	(C)	66,85	66,9	66,9
	Fracción molar de Propileno		0,931	0,931	0,930
	Flujo de energía	(kW)	45,2	56,5	63,02
<b>DCOL1 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>585,3</b>	<b>731,6</b>	<b>910,4</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-681,4</b>	<b>-851,7</b>	<b>-1050,1</b>
<b>Ethylene -</b>	Temperatura	(C)	-16,06	-16,06	-15,8
	Fracción molar de Etileno		0,994	0,994	0,979
	Flujo de energía	(kW)	1280,0	1613,1	1878,2
<b>DCOL2 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>872,4</b>	<b>1099,7</b>	<b>1348,9</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-867,6</b>	<b>-1094,1</b>	<b>-1346,0</b>
<b>Propylene -</b>	Temperatura	(C)	43,59	43,6	43,65
	Fracción molar de Propileno		0,987	0,987	0,987
	Flujo de energía	(kW)	124,6	157,7	184,6
<b>DCOL3 -</b>	Duty del condensador	(kW)	<b>3390,4</b>	<b>4324,9</b>	<b>5148,9</b>
	Duty de recalentador	(kW)	<b>-3308,8</b>	<b>-4222,9</b>	<b>-5028,2</b>

Respondiendo a la pregunta de investigación, la precisión de la simulación en DWSIM del tren de separación del proceso MTO de referencia es capaz de predecir más del 98% de exactitud para los requerimientos energéticos de los condensadores y rehervidores, así como el comportamiento de los perfiles de temperatura, presión y composición, en cada columna; en tanto a los flujos y composiciones molares la precisión es mayor del 99% en las corrientes de interés y un rango aproximado de 85% en las corrientes de cola o de menor flujo, respecto a una simulación de literatura desarrollada en Aspen.

## Conclusiones

En general, los resultados mostraron que DWSIM reproduce a nivel semi cuantitativo los datos reportados con ASPEN plus, permitió considerar este software de uso libre como una herramienta válida, así como una primera aproximación en el análisis y simulación del proceso estudiado dentro de un rango aceptable de error para estudios de simulación a nivel académico.

Se obtuvo un modelo robusto y convergente capaz de reproducir la separación de etileno y propileno de alta pureza, así como los requerimientos energéticos asociados a cada unidad de operación especificados en el *Apéndice G*.

Al configurar los datos del caso de estudio basado en el diseño del proceso optimizado se demostró una buena concordancia en la predicción de los componentes mayoritarios (etileno y propileno), con errores bajos, mientras que las mayores discrepancias se presentaron en corrientes de menor flujo molar, por lo que pequeñas variaciones en el flujo calculado generan errores porcentuales elevados y a su vez varían los requerimientos energéticos de algunas unidades. Estas diferencias se atribuyen a variaciones en los modelos termodinámicos, métodos de cálculo y algoritmos de convergencia empleados por cada simulador.

Al analizar la sensibilidad de las variables de respuesta se concluye que la temperatura y presión del alimento no afectan la estabilidad del proceso, mientras el flujo molar no pudo asimilarse en la herramienta, se estima su ejecución de forma manual donde esta converge de manera adecuada; por otra parte, se evidenció que el efecto de la relación de reflujo sobre el consumo energético del condensador y rehervidor es mucho mayor que el presentado por la presión de la columna, puesto que al aumentar el *reflux ratio* en cada columna el consumo de energía se incrementa tanto a baja como a alta presión planteó Moghaddam (2022); esto indicó que ambos

simuladores predijeron de manera consistente la distribución de los principales componentes del proceso.

### **Recomendaciones**

En el *Apéndice G* se detalla los resultados del análisis de sensibilidad para la temperatura y presión de alimentación calculado por el programa mediante esta herramienta, su versatilidad permite ampliar los rangos definidos, pero no es viable.

No es recomendable superar la temperatura estipulada en vista que tiende a repetir los resultados de la iteración anterior, sin embargo el límite inferior permitió una reducción de  $-6,6\text{ }^{\circ}\text{C}$  de la temperatura inicial o sea  $6,8\text{ }^{\circ}\text{C}$ ; se notó que influye a favor de la selectividad de etileno y propileno en las corrientes *C2 Mixtures* y *C3 Mixtures* respectivamente, sin embargo aunque la fracción molar aumente en las corrientes de interés, el deber del rehervidor 1 aumentará, en tanto las otras columnas mantendrán sus valores por lo que es irrelevante para el caso.

Igualmente, para el escenario de variación de la presión, aunque converge después de los límites establecidos por heurística, no tiene relevancia para el caso por ende se propone probar distintos escenarios de convergencia para el análisis de sensibilidad frente al efecto del *reflux ratio* considerado más influyente, y en su defecto el valor específico del rehervidor y diámetro de cada columna, los cuales no son considerados en este trabajo ni en la literatura estudiada.

Se recomienda la selección del *Column Solver* propuesto en la metodología para cada columna de destilación por su velocidad de convergencia frente al proceso; donde Wang Henke es rápida con mezclas simples de hidrocarburos, sin embargo, se recomienda usar Naphthali-Sandholm en la corriente compleja. En su defecto para el caso base el sistema converge de manera precisa sin importar la elección del solucionador pese a esto el tiempo de convergencia varía.

### Referencias Bibliográficas

- Arvidsson, M., Haro, P., Morandín, M., & Harvey, S. (2016). Comparative thermodynamic analysis of biomass gasification-based light olefin production using methanol or DME as the platform chemical. *Chemical Engineering Research and Design*, 115, Part A, November 2016, Pages 182-194. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2016.09.031>
- Detchusananard, T., Prasertcharoensuk, P., Patcharavorachot, Y., Maréchal, F., & Arpornwichanop, A. (2022). Exergy and exergoeconomic assessment of sustainable light olefins production from an integrated methanol synthesis and methanol-to-olefins system. *Journal of Cleaner Production*, 347, Article 131209. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.131209>
- Dimian, A. C., & Bildea, C. S. (2018). Energy efficient methanol-to-olefins process. *Chemical Engineering Research & Design*, 131, 41–54. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.11.009>
- Dimian, A. C., Bildea, C. S., & Kiss, A. A. (2019). Methanol-To-Olefin Process. In *Applications in Design and Simulation of Sustainable Chemical Processes* (pp. 147–182). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/b978-0-444-63876-2.00004-8>
- DWSIM. (2026). DWSIM- Open- Source Chemical Process Simulator. disponible en: <https://dwsim.org>
- IQR Ingeniería Química. (2022, febrero). DWSIM: Simulador de procesos químicos open source. <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2022/02/DWSIM-simulador-procesos-quimicos-open-source.html>
- Ortiz-Espinoza, A. P., El-Halwagi, M. M., & Jiménez-Gutiérrez, A. (2015). Analysis of two Alternatives to Produce Ethylene from Shale Gas. In *Computer Aided Chemical*

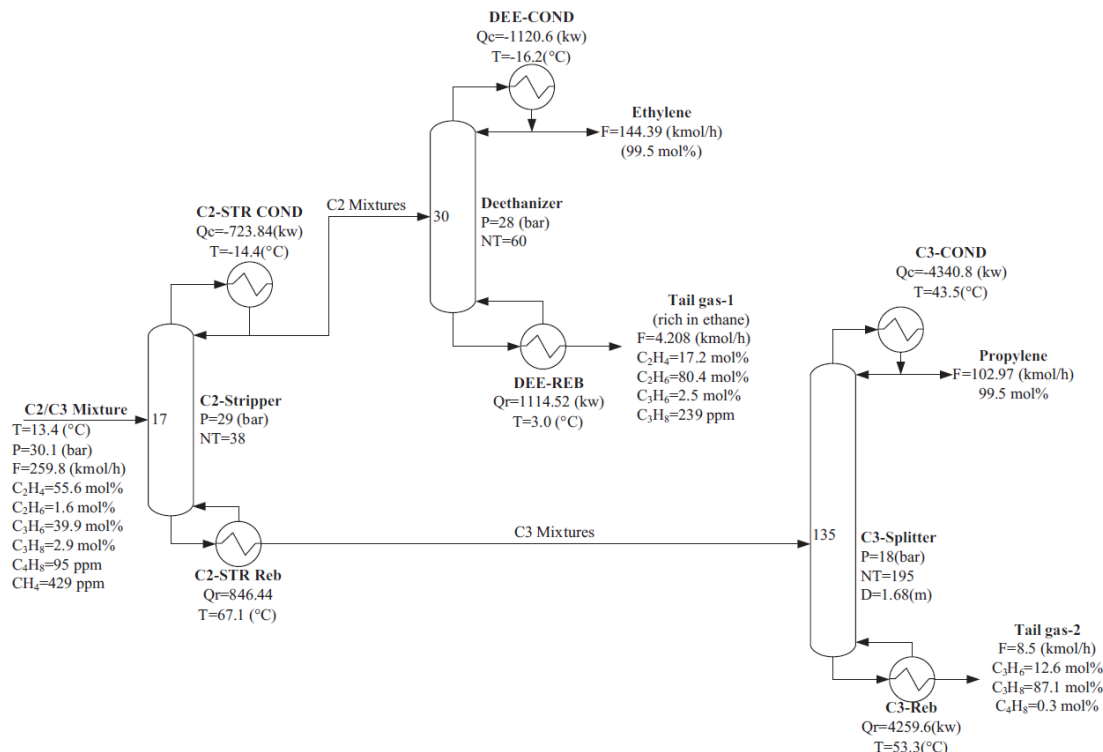
- Engineering (Vol. 37, pp. 485–490). <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63578-5.50076-1>
- Moghaddam, A. H. (2022). Simulation and optimization of separation section in methanol to olefin (MTO) process based on statistical approach. *Chem. Pap.* 76, 4787–4794 <https://doi.org/10.1007/s11696-022-02190-4>
- Najafabadi, A. T., Fatemi, S., Sohrabi, M., & Salmasi, M. (2012). Kinetic modeling and optimization of the operating condition of MTO process on SAPO-34 catalyst. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18(1), 29–37. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2011.11.088>
- Yang, L., Liu, S., Chang, C., Yang, S., & Shen, W. (2024). An efficient and invertible machine learning-driven multi-objective optimization architecture for light olefins separation system. *Chemical Engineering Science*, 285, Article 119553. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119553>
- Ying, L., Yuan, X., Ye, M., Cheng, Y., Li, X., & Liu, Z. (2015). A seven lumped kinetic model for industrial catalyst in DMTO process. *Chemical Engineering Research and Design*, 100, 179–191. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.05.024>
- Yu, B., & Chien, I. (2016). Design and Optimization of the Methanol-to-Olefin Process. Part I: Steady-State Design and Optimization. *Chemical Engineering & Technology*, 39(12), 2293–2303. *Portico*. <https://doi.org/10.1002/ceat.201500654>

## Apéndices

## Apéndice A. Proceso de selección de condiciones operaciones del caso base en ASPEN Plus.

## Figura A1

Diagrama de flujo del diseño de la segunda sección de separación del proceso MTO.



Nota: Tomado de Yu & Chien (2016)

## Tabla A1

Propiedades reportadas para las corrientes de flujo de material simuladas en ASPEN Plus.

Corriente	Temperatura °C	Presión bar	Flujo molar kmol/h	Fracción de Ethane [C2H6]	Fracción de Propane [C3H8]	Fracción de Ethylene [C2H4]	Fracción de Propylene [C3H6]
C2/C3 Mixture	13,4	30,1	259,8	0,016	0,029	0,556	0,399
C2 Mixtures	-14,4	29	-	-	-	-	-
C3 Mixtures	67,1	29	-	-	-	-	-
Ethylene	-16,2	28	144,39	-	-	0,995	-
Tail gas 1	3	28	4,208	0,803	0	0,172	0,025
Propylene	43,5	18	102,97	-	-	-	0,995
Tail gas 2	53,3	18	8,5	-	0,871	-	0,129

**Tabla A2***Consumo Energético en ASPEN Plus.*

Columna de Destilación		Heat Duty	Unidad
C2-STR	C2-STR Cond	-723,84	kW
	C2-STR Reb	846,44	kW
DEE	DEE Cond	-1120,6	kW
	DEE Reb	1114,52	kW
C3-STR	C3-Cond	-4340,8	kW
	C3-Reb	4259,6	kW

*Nota:* Adaptado de Yu & Chien (2016)**Tabla A3***Abreviación y nombre de las corrientes, equipos y flujos de energía implementados en el proceso.*

Corriente	(Yu & Chien) ASPEN	Este trabajo DWSIM
Mezcla de alimentación	C2/C3 Mixture	
Mezcla C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> /C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C2 Mixtures	
Mezcla C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> /C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	C3 Mixtures	
Etileno (C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> )	Ethylene	
Etano (C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> )	Tail gas 1	
Propileno (C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> )	Propylene	
Propano (C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )	Tail gas 2	

Equipo	Columna de Destilación	
C2-Stripper	C2-STR	DCOL1
Deetanizer	DEE	DCOL2
C3-Splitter	C3-STR	DCOL3

Flujo de Energía	Energy Stream	
Condensador DCOL1	C2-STR Cond	
Rehervidor DCOL1	C2-STR Reb	
Condensador DCOL2	DEE Cond	
Rehervidor DCOL2	DEE Reb	
Condensador DCOL3	C3-Cond	
Rehervidor DCOL3	C3-Reb	

	Abreviación	Unidad
Temperatura	T	°C
Presión	P	bar

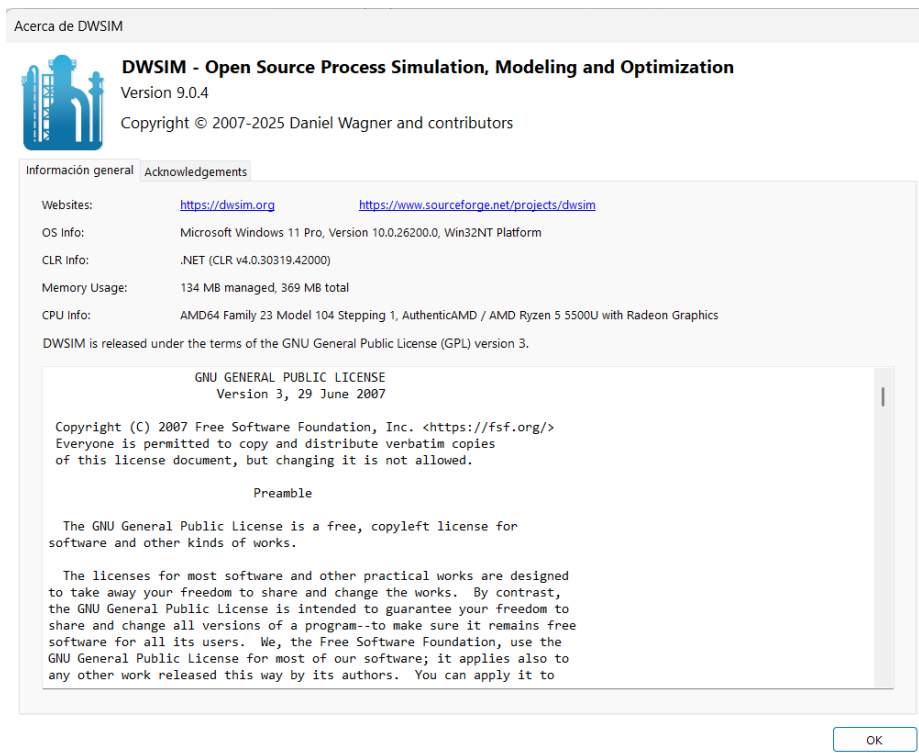
Flujo molar	F	kmol/h
Número de Etapas	NT	
Etapas de alimentación	NF	
Servicio del condensador	Qc	kW
Deber del rehervidor	Qr	kW
Fracción molar líquido	X	
Fracción molar vapor	Y	

*Nota:* Adaptado de Yu & Chien (2016)

## Apéndice B. Reconocimiento exploratorio del interfaz y configuración en DWSIM.

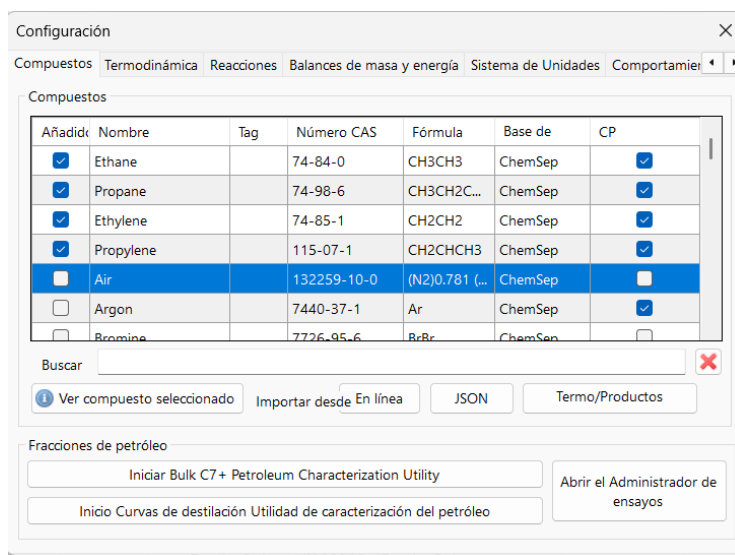
### Figura B1

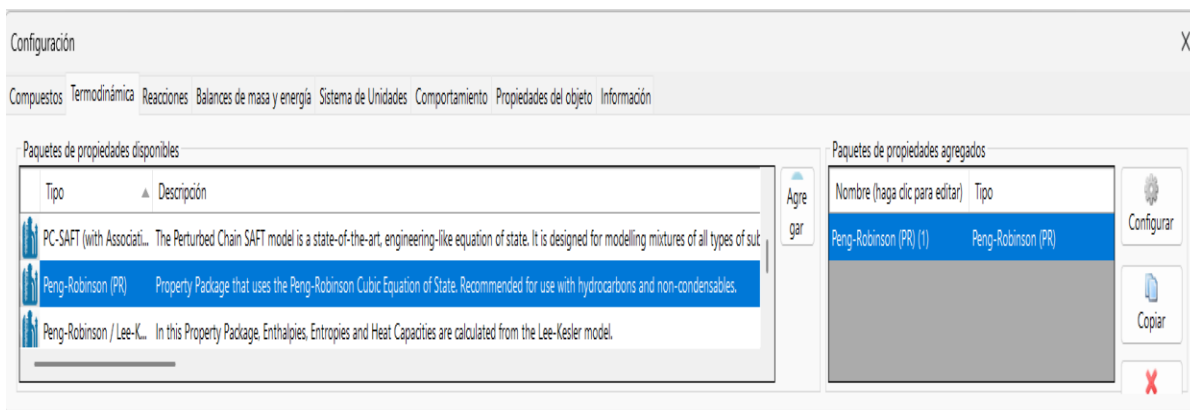
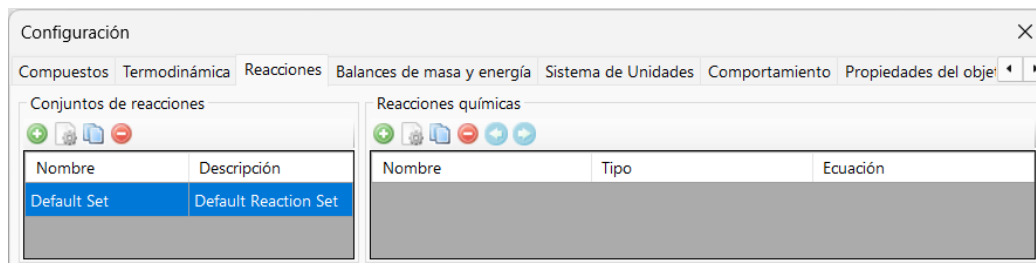
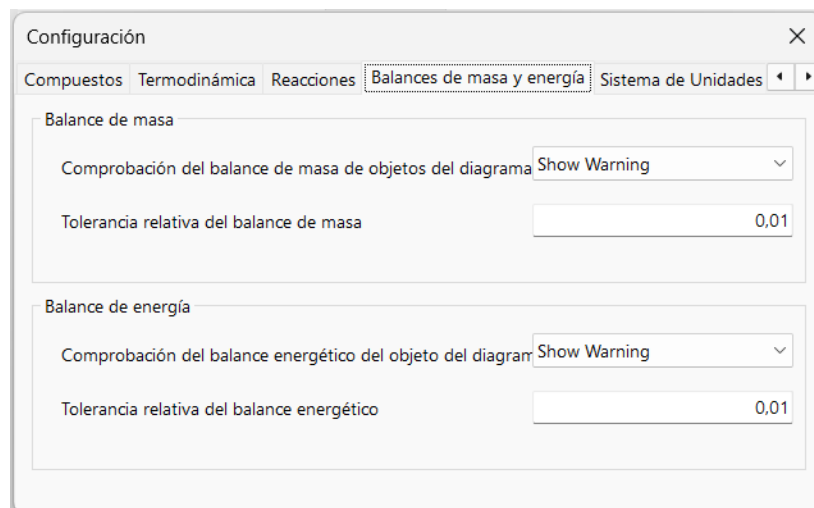
Información acerca de DWSIM V 9.0.4



### Figura B2

Configuración. (Compuestos)



**Figura B3***Configuración (Termodinámica)***Figura B4***Configuración (Reacciones)***Figura B5***Configuración (Balances de masa y energía)*

**Figura B6***Configuración (Sistema de unidades)*

Configuración

Compuestos Termodinámica Reacciones Balances de masa y energía Sistema de Unidades Comportamiento Propiedades del c

Unidades

Sistema de Unidades SI (Engineering)

Propiedad	Unidad	Propiedad	Unidad
Temperatura	C	Presión	bar
Caudal másico	kg/h	Caudal molar	kmol/h
Caudal volumétrico	m <sup>3</sup> /h	Entalpía específica	kJ/kg
Entropía específica	kJ/[kg.K]	Peso molecular	kg/kmol
Densidad	kg/m <sup>3</sup>	Tensión superficial	N/m
Capacidad térmica	kJ/[kg.K]	Conductividad térmica	W/[m.K]
Viscosidad cinemática	cSt	Viscosidad dinámica	cP
Diferencia de temperatura	C.	Diferencia de presión	bar
Longitud/Cabeza	m	Power / Heat Duty / Energy F...	kW
Hora	s	Volumen	m <sup>3</sup>
Volumen molar	m <sup>3</sup> /kmol	Área	m <sup>2</sup>
Diámetro/Espesor	mm	Fuerza	N
Aceleración	m/s <sup>2</sup>	Coefficiente de transferencia d...	W/[m <sup>2</sup> .K]
Concentración molar	mol/m <sup>3</sup>	Concentración de masa	kg/m <sup>3</sup>
Velocidad de reacción	mol/[m <sup>3</sup> .s]	Volumen específico	m <sup>3</sup> /kg
Entalpía molar	kJ/kmol	Entropía molar	kJ/[kmol.K]
Velocidad	m/s	Factor de ensuciamiento	K.m <sup>2</sup> /W
Resistencia específica a la torta	m/kg	Filtro de resistencia media	m <sup>-1</sup>
Compresibilidad isotérmica	1/Pa	Coefficiente de Joule Thomson	K/Pa
Conductancia	[kg/s]/[Pa <sup>0.5</sup> ]	Distancia / Longitud	m
Heat/Energy	kJ	Mass	kg
Moles	kmol	Specific Power	kW/[ton/h]

Tareas

Crear nuevo... Clon seleccionado Eliminar seleccionado Cargar desde archivo Guardar en archivo

**Figura B7***Configuración (Comportamiento)*

Configuración

Reacciones Balances de masa y energía Sistema de Unidades Comportamiento Propiedades del objeto Información

Objetos de diagrama de flujo

Omitir cálculos de equilibrio en flujos de materiales bien definidos

Fase de fuerza en flujos de materiales Do Not Force

Forzar el cálculo de objetos incluso cuando los parámetros de entrada no cambian

Modo de cálculo de bloques de especificación After Source Object

Ordenar compuestos por Default (As Added)

Formato de número

Esquema de formato de valores numéricos G6 [Más información...](#)

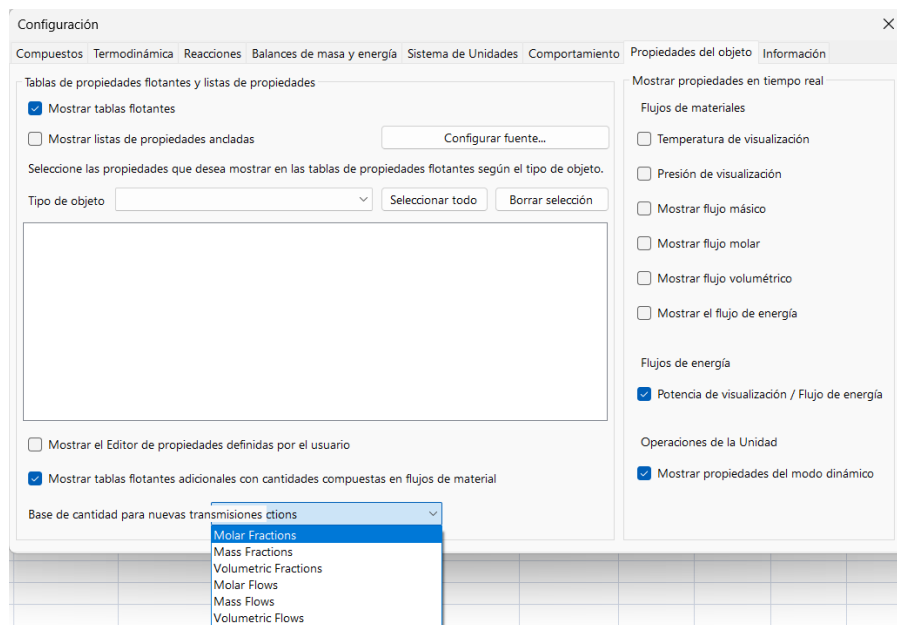
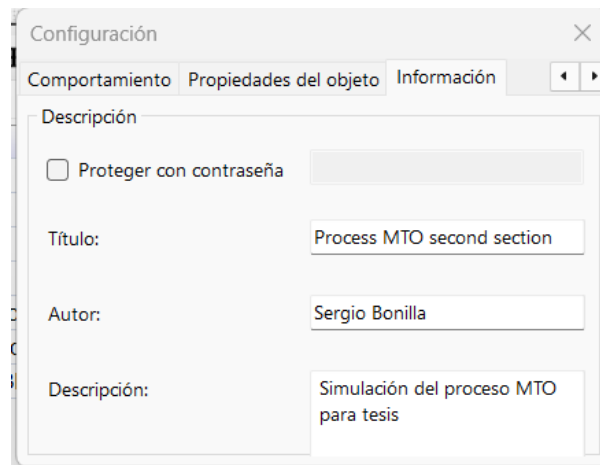
Esquema de formato de composición de secuencias

General

Enable Undo/Redo

Incluir mensajes de diagrama de flujo a

F  
G  
G2  
G4  
G6  
G8  
G10  
N  
N2  
N4  
N6  
R  
E  
E1  
E2  
E3  
E4  
E6

**Figura B8***Configuración (Propiedades de objeto)***Figura B9***Configuración (Información)*

### Contact Information

Developer: Daniel Wagner Oliveira de Medeiros

Official Website: <https://dwsim.org>

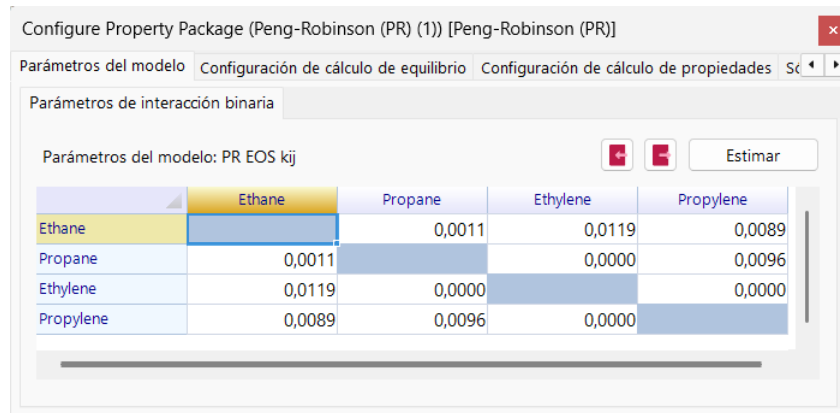
Source Code: <http://github.com/DanWBR/dwsim>

Support: <https://github.com/DanWBR/dwsim/discussions>

## Apéndice C. Setting del paquete termodinámico de propiedades Peng-Robinson (PR).

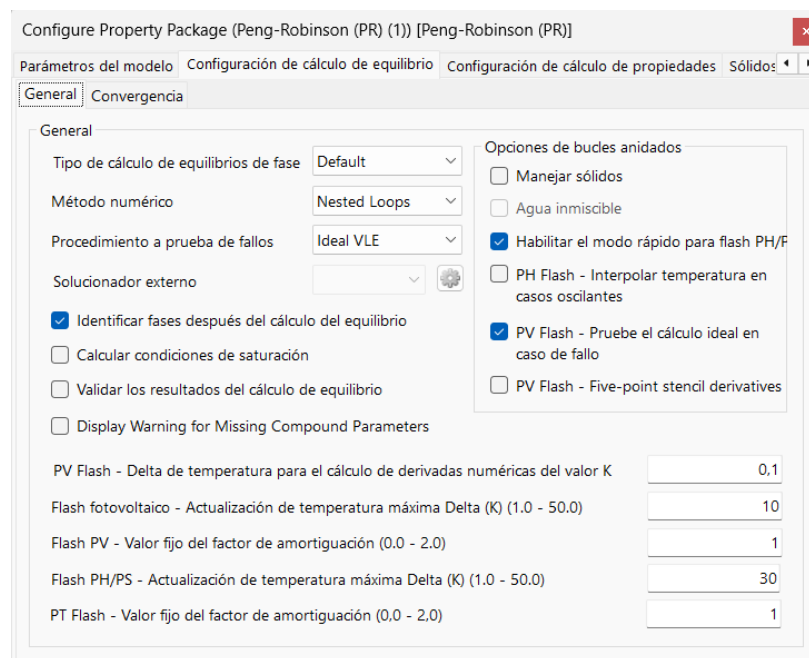
### Figura C1

*Configure Property Package (Parámetros del modelo)*



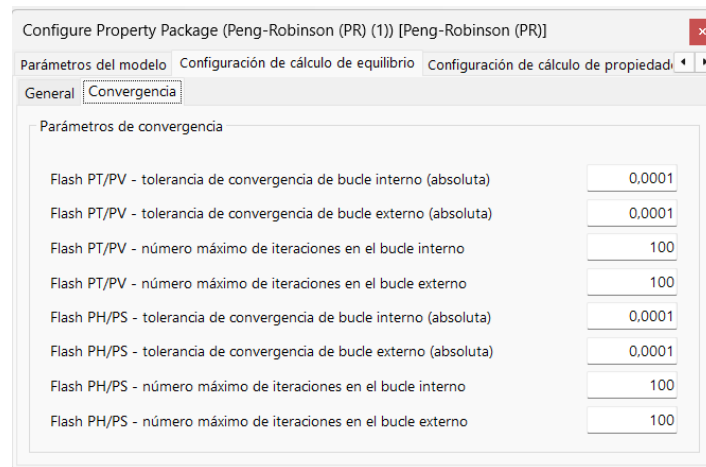
### Figura C2

*Configure Property Package (Configuración de cálculo de equilibrio, General)*

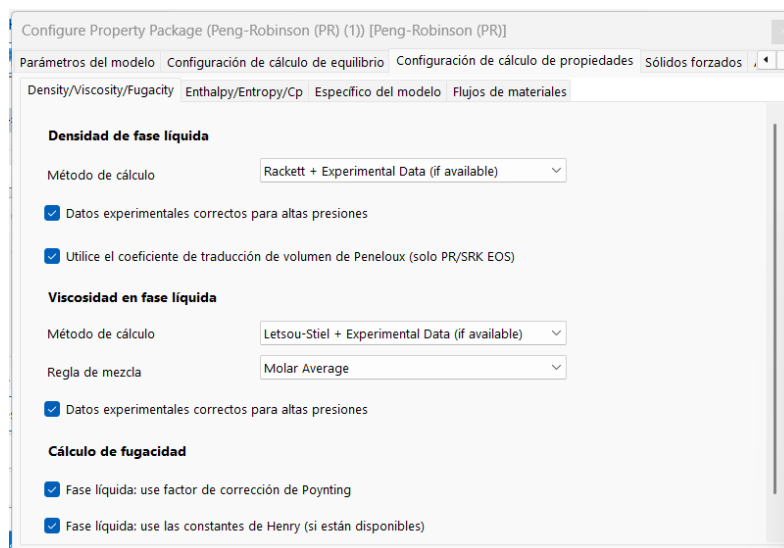


### Figura C3

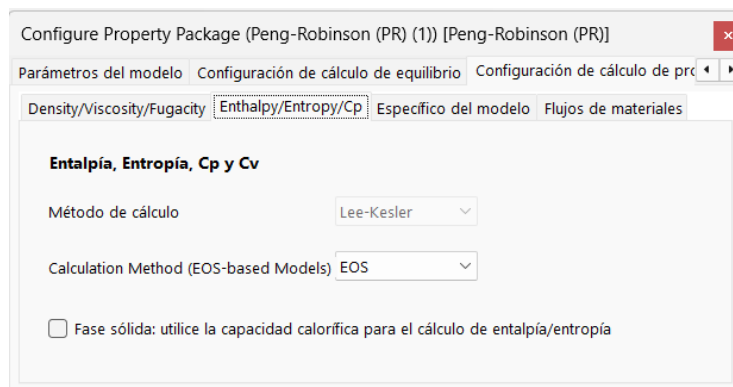
*Configure Property Package (Configuración de cálculo de equilibrio, Convergencia)*

**Figura C4**

*Configure Property Package (Configuración de cálculo de propiedades, Density/Viscosity/Fugacity)*

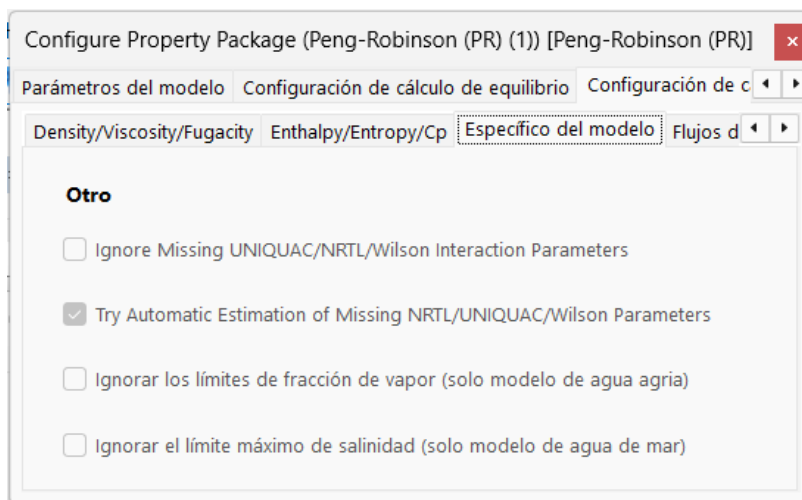
**Figura C5**

*Configure Property Package (Configuración de cálculo de propiedades, Entalpy/Entropy/Cp)*

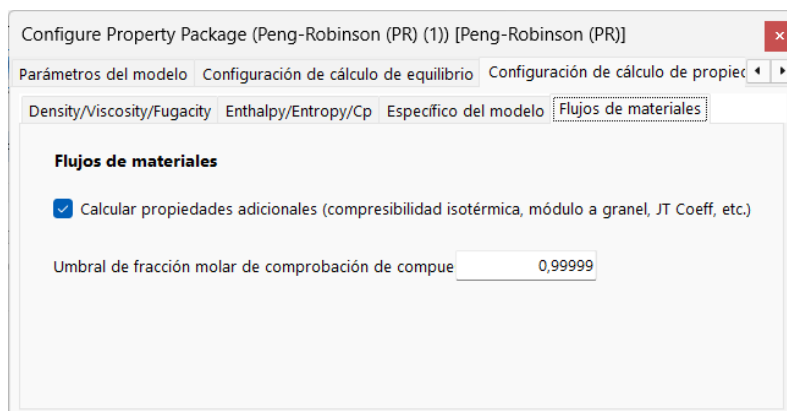


**Figura C6**

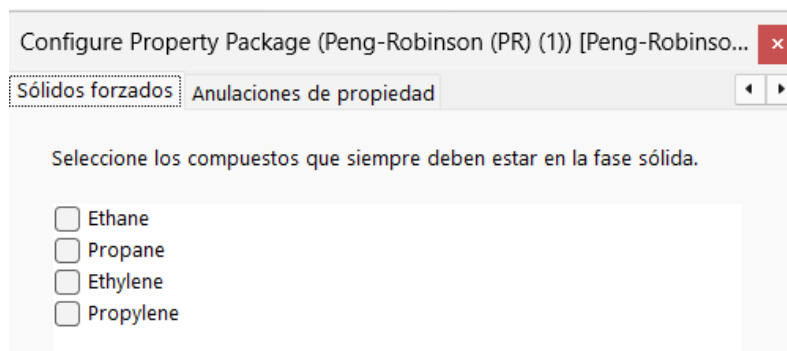
*Configure Property Package (Configuración de cálculo de propiedades, Específico del modelo)*

**Figura C7**

*Configure Property Package (Configuración de cálculo de propiedades, Flujos de Materiales)*

**Figura C8**

*Configure Property Package (Sólidos forzados)*



**Apéndice D. Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL1.****Figura D1***DCOL1 Información General (General)*

DCOL1 (Distillation Column)

Información general

Objeto: DCOL1

Estado: Calculado (25/03/2026 7:58:42 a. m.)

Vinculado a:

General Características técnicas Etapas Conexiones Estimaciones Resultados

Modo de funcionamiento del absorbedor:

Número de etapas: 38

Condenser/Top Pressure: 29 bar

Caída de presión de la columna: 0 bar

Espaciado de la bandeja (tamaño): 0,5 m

Número máximo de iteraciones: 100

Tolerancia de convergencia: 1E-05

Paquete de Propiedad: Peng-Robinson (PR) (1)

Column Solver: Naphthali-Sandholm (Simultaneous Correction)

Proveedor de estimaciones iniciales: Internal (Default)

Generar informe de convergencia

Pruebe la convergencia con la configuración actual

Prueba la configuración actual del solucionador sin actualizar los flujos de productos

**Figura D2***DCOL1 Información General (Características técnicas)*

DCOL1 (Distillation Column)

Información general

Objeto: DCOL1

Estado: Calculado (25/03/2026 7:58:42 a. m.)

Vinculado a:

General Características técnicas Etapas Conexiones Estimación

Condensador Recalentador

Sin condensador (absorbedor reherido)

Tipo de condensador: Total

Caída de presión del condensador: 0 bar

Especificación: Reflux Ratio

Compuesto: Ethylene

1,35

Caudal de producto de vapor: 0 mol/s

Subenfriamiento total del condensador: 0 C.

DCOL1 (Distillation Column)

Información general

Objeto: DCOL1

Estado: Calculado (25/03/2026 7:58:42 a. m.)

Vinculado a:

General Características técnicas Etapas Conexiones Estimación

Condensador Recalentador

Sin hervidor (absorbedor de reflujo)

Especificación: Product Molar Flow

Compuesto: Propylene

110,5 kmol/h

**Figura D3***DCOLI Información General (Conexiones, Conexiones de transmisión)*

General Características técnicas Etapas Conexiones Estimacio

Conexiones de transmisión Asociaciones Stream-Stage Especi

Alimenta Productos Tarea Sorteos laterales

Nombre	Flujo de material
Column Feed Port #1	C2/C3 Mixture
Column Feed Port #2	

Conexiones de transmisión Asociaciones Stream-Stage Especi

Alimenta Productos Tarea Sorteos laterales

Nombre	Flujo de material
Distillate	C2 Mixtures
Bottoms	C3 Mixtures
Overhead Vapor	

Alimenta Productos Tarea Sorteos laterales

Nombre	Flujo de energía
Condenser Duty	C2-STR Cond
Reboiler Duty	C2-STR Reb

**Figura D4***DCOLI Información General (Conexiones, Asociaciones Stream-Stage)*

General Características técnicas Etapas Conexiones Estimacio

Conexiones de transmisión Asociaciones Stream-Stage Especi

Tipo de puerto	Nombre de la secuencia	Ubicación del escenario
Feed	C2/C3 Mixture	Stage17
Distillate	C2 Mixtures	Condenser
Bottoms Product	C3 Mixtures	Reboiler

**Apéndice E. Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL2.****Figura E1***DCOL1 Información General (General)*

DCOL2 (Distillation Column)

Información general

Objeto: DCOL2

Estado: Calculado (25/03/2026 7:58:43 a. m.)

Vinculado a:

General | Características técnicas | Etapas | Conexiones | Estimaciones

Modo de funcionamiento del absorbedor:

Número de etapas: 60

Condenser/Top Pressure: 28 bar

Caída de presión de la columna: 0 bar

Espaciado de la bandeja (tamaño): 0,5 m

Número máximo de iteraciones: 100

Tolerancia de convergencia: 1E-05

Paquete de Propiedad: Peng-Robinson (PR) (1)

Column Solver: Wang-Henke (Bubble Point)

Proveedor de estimaciones iniciales: Internal (Default)

Generar informe de convergencia

Pruebe la convergencia con la configuración actual

Pruebe la configuración actual del solucionador sin actualizar los flujos de productos

**Figura E2***DCOL2 Información General (Características técnicas)*

General | Características técnicas | Etapas | Conexiones | Estimaciones

Condensador | Recalentador

Sin condensador (absorbedor reherido)

Tipo de condensador: Total

Caída de presión del condensado: 0 bar

Especificación: Reflux Ratio

Compuesto: Ethylene

2,6

Caudal de producto de vapor: 0 mol/s

Subenfriamiento total del condensador: 0 C.

Sin hervidor (absorbedor de reflujo)

Especificación: Product Molar Flow

Compuesto: Ethane

4,9 kmol/h

**Figura E3***DCOL2 Información General (Conexiones)*

The figure displays three screenshots of the DWSIM software interface, showing the 'Conexiones' (Connections) tab for a distillation column. The interface is divided into three sections, each with a 'Conexiones de transmisión' (Transmission Connections) sub-tab.

**Section 1 (Top):** Shows the 'Alimenta' (Feed) sub-tab. The table lists connections for material flow:

Nombre	Flujo de material
Column Feed Port #1	C2 Mixtures
Column Feed Port #2	

**Section 2 (Middle):** Shows the 'Productos' (Products) sub-tab. The table lists connections for product streams:

Nombre	Flujo de material
Distillate	Ethylene
Bottoms	Tail gas-1
Overhead Vapor	

**Section 3 (Bottom):** Shows the 'Tarea' (Task) sub-tab. The table lists connections for energy flow:

Nombre	Flujo de energía
Condenser Duty	DEE-Cond
Reboiler Duty	DEE-Reb

**Figura E4***DCOL2 Información General (Conexiones, Asociaciones Stream-Stage)*

The figure displays a screenshot of the DWSIM software interface, showing the 'Asociaciones Stream-Stage' (Stream-Stage Associations) sub-tab. The table lists the type of port, the sequence name, and the location of the scenario:

Tipo de puerto	Nombre de la secuencia	Ubicación del escenario
Feed	C2 Mixtures	Stage30
Distillate	Ethylene	Condenser
Bottoms Product	Tail gas-1	Reboiler

**Apéndice F. Especificaciones requeridas por la unidad de operación DCOL3.****Figura F1***DCOL3 Información General (General)*

DCOL3 (Distillation Column)

Información general

Objeto: DCOL3

Estado: Calculado (25/03/2026 7:58:43 a. m.)

Vinculado a:

General | Características técnicas | Etapas | Conexiones | Estimaciones | Resultados

Modo de funcionamiento del absorbedor:

Número de etapas: 195

Condenser/Top Pressure: 18 bar

Caída de presión de la columna: 0 bar

Espaciado de la bandeja (tamaño): 0,5 m

Número máximo de iteraciones: 100

Tolerancia de convergencia: 1E-05

Paquete de Propiedad: Peng-Robinson (PR) (1)

Column Solver: Modified Wang-Henke (Bubble Point)

Proveedor de estimaciones iniciales: Internal (Default)

Generar informe de convergencia

Prueba la convergencia con la configuración actual

Prueba la configuración actual del solucionador sin actualizar los flujos de productos

Distillation Column: DCOL3 | DCOL3 (Distillation Column)

**Figura F2***DCOL3 Información General (Características técnicas)*

General | Características técnicas | Etapas | Conexiones | Estimaciones | Resultados

Condensador | Recalentador

Sin condensador (absorbedor rehecido)

Tipo de condensador: Total

Caída de presión del condensado: 0 bar

Especificación: Reflux Ratio

Compuesto: 11,3

Caudal de producto de vapor: 0 mol/s

Subenfriamiento total del condensador: 0 C.

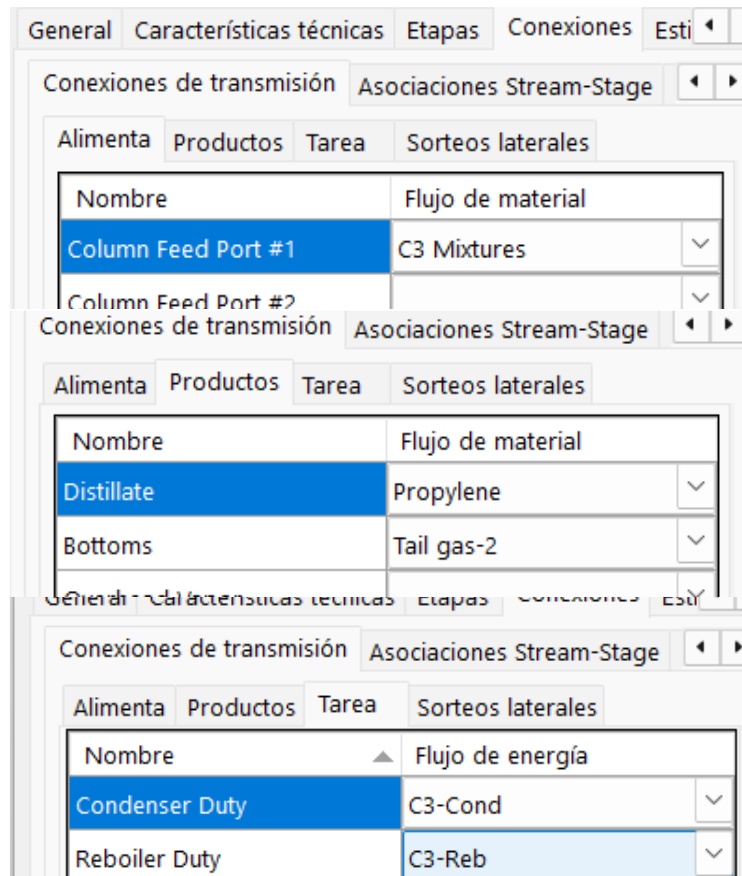
Condensador | Recalentador

Sin hervidor (absorbedor de reflujo)

Especificación: Product Molar Flow

Compuesto: Propane

8,2 kmol/h

**Figura F3***DCOL3 Información General (Conexiones)***Figura F4***DCOL3 Información General (Conexiones, Asociaciones Stream-Stage)*

Tipo de puerto	Nombre de la secuencia	Ubicación del escenario
Feed	C3 Mixtures	Stage135
Distillate	Propylene	Condenser
Bottoms Product	Tail gas-2	Reboiler

Apéndice G. Ventanas de resultados en DWSIM.

Figura G1.

Resultados DCOL1

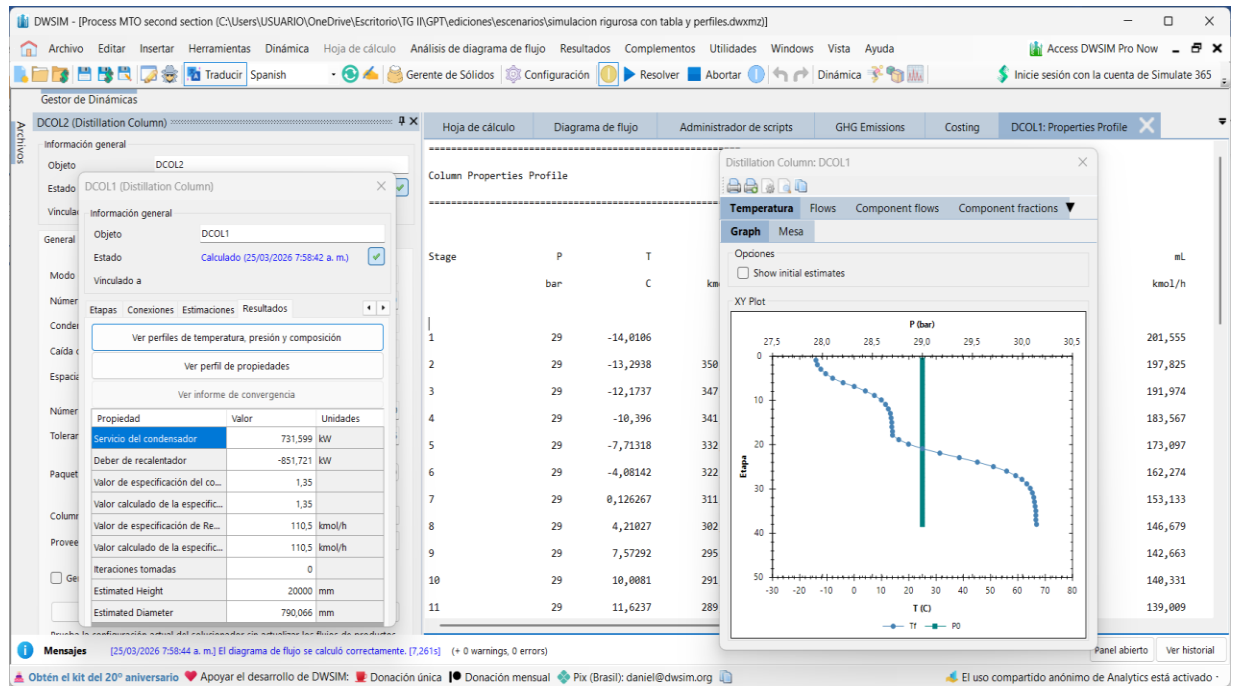


Figura G2.

Resultados DCOL2

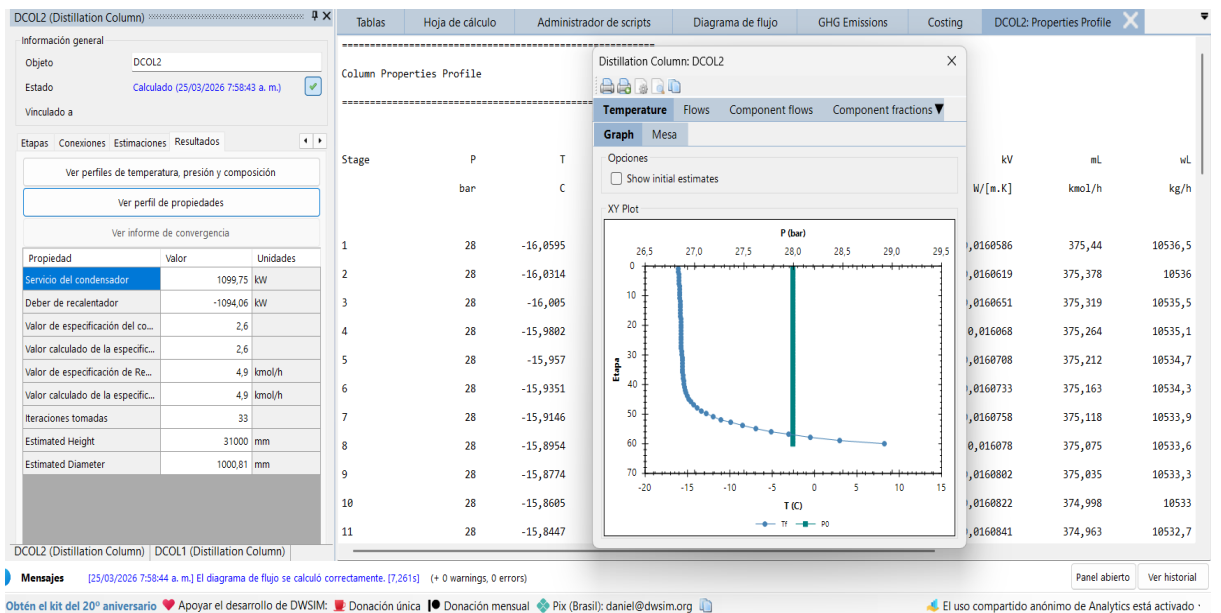


Figura G3.

Resultados DCOL3

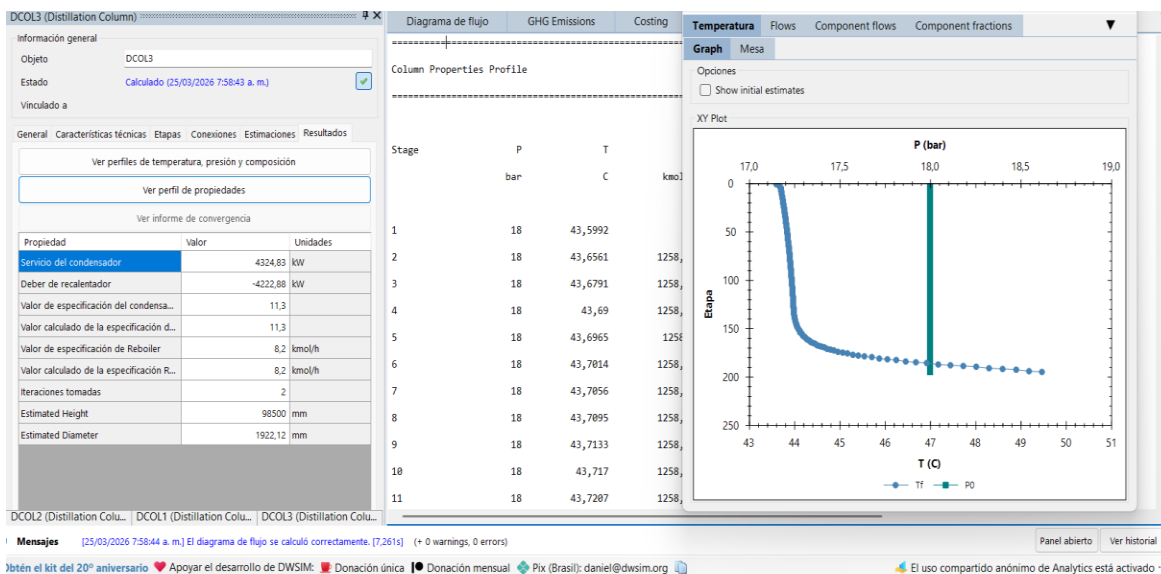
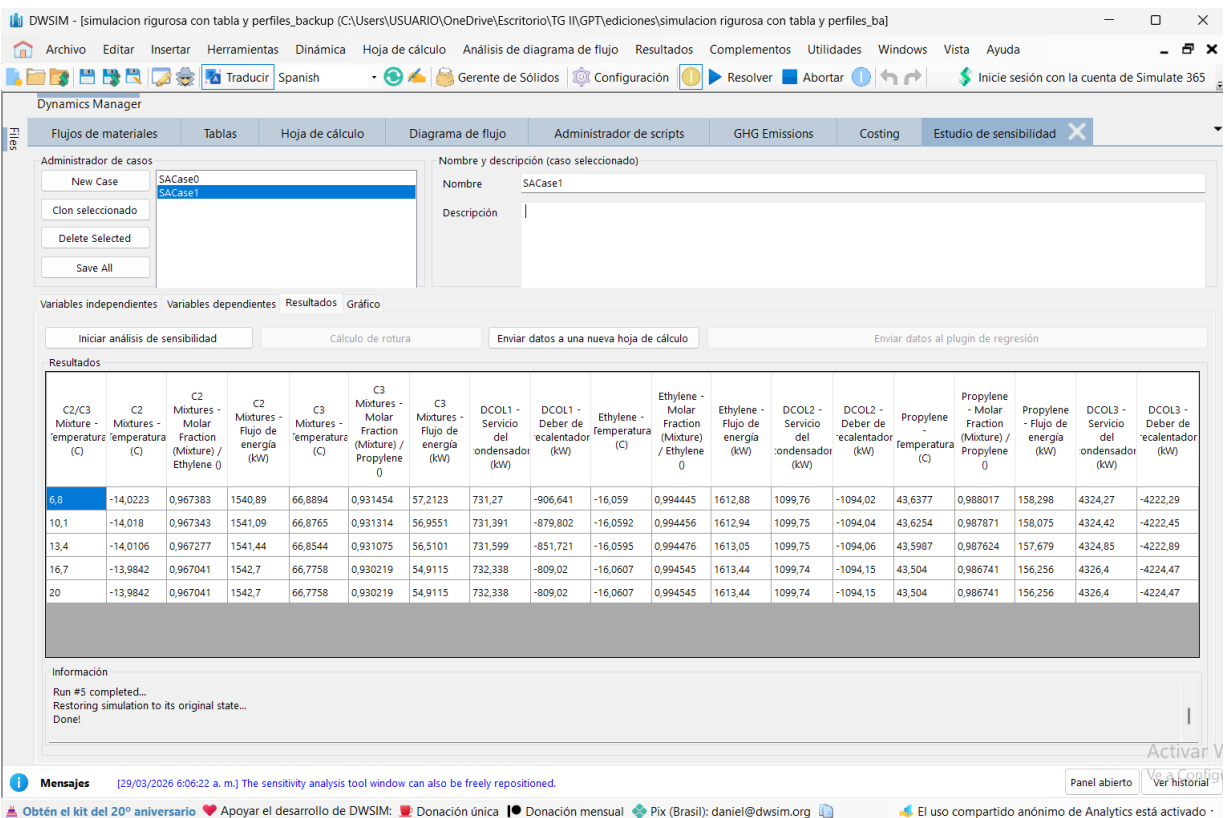


Figura G4.

Resultado de sensibilidad, variable temperatura de alimentación



**Figura G5.***Resultado de sensibilidad, variable presión de alimentación*