



UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO

CAMPUS GUANAJUATO

DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

POSGRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

“SIMULACIÓN, DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UNA BIOREFINERÍA INTEGRADA PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL DE SEGUNDA GENERACIÓN”

**TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:**

**DOCTORA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA
QUÍMICA**

PRESENTA:

M.I.Q. VIVIANA PALOMA PEÑALOZA MEZA

DIRECTOR:

DR. HÉCTOR HERNÁNDEZ ESCOTO

CO-DIRECTOR:

DR. SALVADOR HERNÁNDEZ CASTRO

i

Declaratoria:

Por medio de la presente me responsabilizo de la autenticidad y originalidad del presentetrabajo titulado:

“Simulación, diseño y optimización de una biorefinería integrada para la producción de bioetanol de segunda generación”



Director de Tesis

Dr. Héctor Hernández Escoto
Universidad de Guanajuato



Codirector de Tesis

Dr. Salvador Hernández Castro
Universidad de Guanajuato

Miembros del jurado del examen profesional que, para obtener el grado de Doctora en Ciencias en Ingeniería Química, presenta el M.I.Q. Viviana Paloma Peñaloza Meza, con el trabajo titulado:

“Simulación, diseño y optimización de una biorefinería integrada para la producción de bioetanol de segunda generación”

Dr. Fabricio Omar Barroso Muñoz

Dr. Ricardo Morales Rodríguez

Dr. Juan Carlos Torres Guzmán

Dra. Araceli Jacobo Azuara

Dr. Rafael Maya Yescas

Yo no quiero reprocharte, tu silencio, ni tu olvido
Ni tampoco recordarte, que te quiero de verdad
No me digas lo que has hecho, ni me digas donde has ido
Solo quiero contemplarte y olvidar mi soledad

Volver a verte, volver a verte saber que
Vives en realidad,
Mirar tus ojos besar tu frente, volver a verte
Y nada más

Volver a verte...
Y nada más...

Dedicada a Blanquita† (1949-2017)

En mi corazón, tú vivirás
Desde hoy será y para siempre
La memoria falla el corazón no olvida...

Mi voz alabará
Tu santo nombre allí,
Y mi alma gozará
Cerca de Ti.

IN MEMORIAM

Silvia Peñaloza Bruno†

(1948-2018)

Claudia Peñaloza Bruno†

(1956-2021)

Jorge Manuel Salinas Linares†

(1952-2021)

Zaira Ivett Magaña Peñaloza†

(1983-2021)

Juan Manuel Meza Ramírez†

(1954-2022)

Él enjugará toda lágrima de sus ojos, y ya no habrá muerte, ni habrá más duelo, ni clamor, ni dolor, porque las primeras cosas han pasado...

*Fui dueña de cada segundo que este mundo pudo darnos,
vi muchos lugares,
las cosas que hice,
con cada hueso roto,
juro que he vivido*

AGRADECIMIENTOS

A Dios por permitirme vivir esta aventura, por darme el entendimiento, sabiduría y fortaleza para seguir siempre adelante, aun cuando ya no quería hacerlo.

A mi mamá por ser mi pilar y cuidarme donde quiera que esté.

A mi papá por contribuir a ser quien soy.

A mis queridas amigas Lizeth, Anjuli y Jannet que son como mis hermanas.

A todos mis amigos por ser mis confidentes.

A mis maestros que han sido una guía, ejemplo y fuente de inspiración para mí.

A la familia que ha estado cerca de mí.

A Brisa por nunca soltarme la mano.

A mi asesor Héctor Hernández Escoto por su apoyo y paciencia.

A la Universidad de Guanajuato por formarme como investigadora.

A mi alma mater el Instituto Tecnológico de Cd. Madero por haberme formado como Ingeniero Químico.

A CONACYT por el apoyo en mi formación.

A los que han sido mis compañeros de trabajo porque nunca se deja de aprender, por convertirse en mis amigas Elena y Lizbeth.

A quienes han sido mis estudiantes y que me han contagiado su vitalidad y alegría.

A las personas que han llegado a mi vida en los últimos años y se han quedado, y también a las que se han ido, por irse.

Y por último quiero agradecerme a mí misma por nunca haberme rendido, a pesar de todo, por levantarme cada vez que me he caído, y por nunca dejar de luchar.

*Soñar, lo imposible soñar,
vencer al invicto rival,
sufrir el dolor insufrible,
morir por un **noble ideal**.*

*Saber enmendar el error,
amar con pureza y bondad,
creer en un sueño imposible,
con fe una estrella alcanzar.*

*Ese es mi afán,
y lo he de lograr,
no importa el esfuerzo
no importa el lugar,
saldré a combatir y mi lema será
defender la virtud, aunque deba
el infierno pisar.*

*Porque sé que si logro ser fiel
a tan noble ideal
dormirá mi alma en paz al llegar
el instante final.*

*Y será este mundo mejor
porque yo, sin rendirme jamás,
busqué, en mi sueño imposible,
poder una **estrella alcanzar**.*

*Porque sé que si logro ser fiel
a tan noble ideal
dormirá mi alma en paz al llegar
el instante final.*

*Y será este mundo mejor
porque yo, sin rendirme jamás,
busqué, en mi sueño imposible,
soñar, **lo imposible soñar***

Contenido

Declaratoria:	ii
Dedicatoria	iv
In memoriam	v
Agradecimientos	vi
Contenido	viii
Lista de figuras	xii
Lista de tablas	xviii
1. Introducción	1
1.1 Escenario energético y biocombustibles	1
1.2.1 Tipos de biorefinería-procesos en biorefinerías	4
1.2.1 Síntesis de biorefinerías	5
1.2.2 La modelación matemática en las biorefinerías	6
1.2.3 Situación actual de los bioprocesos: Caso Inbicon	10
1.2.3.1 Características de la tecnología principal	10
1.2.3.2 Desarrollo gradual de laboratorio a escala de demostración	11
1.2.3.3 La planta de demostración	11
1.2.3.4 Procesamiento continuo	12
1.2.4 Problemática del uso de modelos matemáticos en la síntesis de biorefinerías	13
1.3 Hipótesis	15
1.4 Objetivo	15
1.4.1 Objetivos específicos	15
1.5 Justificación	16
1.6 Organización de la tesis	17
2. Conceptualización de la biorefinería	19
2.1 Biorefinería en lote	20
2.2 Biorefinerías en continuo	21
2.3 Biorefinería con fermentación integrada para la producción de bioetanol de segunda generación	21

3. Pretratamiento.....	23
3.1 Descripción del proceso de pretratamiento alcalino oxidativo de bagazo de caña de azúcar (BCA)	23
3.2 Descripción del proceso de pretratamiento alcalino oxidativo de bagazo de caña de azúcar (PCA)	25
3.3 Conclusiones	26
4. Sacarificación: Hidrólisis enzimática	27
4.1 Marco de trabajo	28
4.1.1 Descripción del proceso de hidrólisis enzimática	28
4.1.2 Modelo matemático de hidrolisis enzimática	28
4.1.2.1 Antecedentes del modelo matemático.	28
4.1.2.2 Adsorción de enzimas	28
4.1.2.3 Inhibición por producto	29
4.1.2.4 Reactividad de sustrato	29
4.1.2.5 Enzimas	30
4.1.3 Descripción del modelo matemático	30
4.1.3.1 Operación en continuo	34
4.1.4 Marco de trabajo del problema de simulación	35
4.1.4.1 Análisis de grados de libertad.....	36
4.1.5 Estrategia de estudio y simulación.....	37
4.2 Simulación.....	38
4.2.1 Establecimiento de los escenarios de cálculo para la simulación	38
4.2.1.1 Valores de las variables de entrada.....	42
4.2.2 Resultados obtenidos de la simulación	43
4.2.2.1 Concentración de agua en la corriente de salida.....	43
4.2.2.2 Concentración de lignina en la corriente de salida	43
4.2.2.3 Concentración de sustrato en la corriente de salida.....	43
4.2.2.4 Concentración de celulosa en la corriente de salida.....	48
4.2.2.5 Concentración de hemicelulosa en la corriente de salida	48
4.2.2.6 Concentración de glucosa en la corriente de salida	48
4.2.2.7 Concentración de xilosa en la corriente de salida.....	49
4.3 Conclusiones	58

5. Evaporación para la concentración de azúcares reductores.....	59
5.1 Marco de diseño.....	59
5.1.1 Descripción del proceso de evaporación.....	59
5.1.2 Método de cálculo paso a paso para evaporadores de efecto triple	61
5.2 Simulación.....	65
5.2.1 Concentración de glucosa.....	66
5.2.2 Concentración de xilosa	67
5.2.3 Concentración de agua.....	68
5.2.4 Vapor alimentado	69
5.2.5 Vapor efecto 1, 2 y 3.....	70
5.2.6 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1, 2 y 3	72
5.2.7 Área de efecto 1, 2 y 3.....	75
5.3 Diseño.....	78
5.3.1 Concentración de glucosa.....	79
5.3.2 Concentración de agua.....	81
5.3.3 Vapor alimentado	86
5.3.4 Vapor efecto 1	89
5.3.5 Velocidad de transferencia de calor y área en efecto 1.....	92
5.3.7 Fracción x_3 en la corriente líquida que sale del tercer efecto	97
5.4 Conclusiones	100
6. Fermentación para la obtención de bioetanol 2G.....	101
6.1 Marco de diseño y reacción	101
6.1.3 Marco de trabajo del problema de diseño	106
6.2 Simulación.....	107
6.2.1 Simulación para un tren de cinco reactores	108
6.3 Diseño.....	109
6.3.1 Concentración máxima de glucosa en la corriente de entrada.....	109
6.3.2 Concentración máxima de etanol en la corriente de salida	112
6.3.3 Concentración máxima de levadura en la corriente de entrada	114
6.3.4 Velocidad de crecimiento de levadura.....	116
6.3.5 Fracción etanol/agua con BCA y PCA	117

6.4 Validación de los resultados obtenidos por optimización con algoritmos genéticos	119
6.4.1 Escenarios de optimización, declaración de función objetivo y variables manipulables	120
6.4.2 Optimización mono objetivo para maximización de producción de bioetanol	120
6.5 Conclusiones	133
7. Integración de la Biorefinería y balances de masa	134
7.1 Biorefinería en lote para BCA y PCA sin evaporación	134
7.2 Biorefinería en lote para BCA y PCA con evaporación	139
7.3 Biorefinería en continuo para BCA y PCA sin evaporación	143
7.4 Biorefinería en continuo para BCA y PCA con evaporación	147
7.5 Biorefinería integrada con BCA y PCA	151
7.5.1 Biorefinería integrada para operación en lote	151
7.5.2 Biorefinería integrada para operación en continuo	152
8. Conclusiones	154
APENDICE A. RESULTADOS GRÁFICOS DEL DISEÑO EN LA EVAPORACIÓN	156
A1. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR	156
A.1.1 Vapor efecto 2	156
A.1.2 Vapor efecto 3	157
A.1.3 Velocidad de transferencia de calor efecto 2	158
A.1.4 Velocidad de transferencia de calor efecto 3	159
A.1.5 Área efecto 2	160
A.1.6 Área efecto 3	161
A2. PAJA DE CAÑA DE AZÚCAR	162
A.2.1 Vapor efecto 2	162
A.2.2 Vapor efecto 3	163
A.2.3 Velocidad de transferencia de calor efecto 2	164
A.2.4 Velocidad de transferencia de calor efecto 3	165
A.2.5 Área efecto 2	166
A.2.6 Área efecto 3	167
Apéndice B. Condiciones de operación de evaporadores	168
Referencias bibliográficas	169

Lista de figuras

Figura 1.1 Clasificación de biocombustibles respecto a la materia prima.....	3
Figura 1.2 Rutas de conversión de biomasa.....	6
Figura 2.1 Diagrama de proceso de operación en lote para la producción de bioetanol lignocelulósico a partir de BCA y PCA.....	20
Figura 2.2 Diagrama de proceso de operación en lote para la producción de bioetanol lignocelulósico a partir de PCA.....	22
Figura 2.3 Diagrama de proceso de operación en continuo para la producción de bioetanol lignocelulósico en una biorefinería integrada a partir de BCA y PCA.....	22
Figura 4.1 Esquema para la reacción de hidrólisis de celulosa.	34
Figura 4.2 Bioreactor en lote.....	34
Figura 4.3. Tren de CSTR para hidrólisis enzimática.....	34
Figura 4.4 Escenarios de simulación para BCA y PCA.....	41
Figura 4.5 Resultados de concentración de sustrato para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	45
Figura 4.6 Resultados de concentración de sustrato para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	46
Figura 4.7 Resultados de la diferencia de porcentaje de glucosa obtenida a partir de BCA entre reactores con una carga de 10% p/v de sólidos, 60 FPU con $D=0.1-1$ 1/h.....	47
Figura 4.8 Resultados de concentración de celulosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	50
Figura 4.9 Resultados de concentración de celulosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	51
Figura 4.10 Resultados de concentración de hemicelulosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	52
Figura 4.11 Resultados de concentración de hemicelulosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	53
Figura 4.12 Resultados de concentración de glucosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.....	54

Figura 4.13 Resultados de concentración de glucosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con D=0-1 1/h.....	55
Figura 4.14 Resultados de concentración de xilosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con D=0-1 1/h.....	56
Figura 4.15 Resultados de concentración de xilosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con D=0-1 1/h.....	57
Figura 5.1 Diagrama simplificado de un evaporador de efecto triple con alimentación hacia delante.....	60
Figura 5.2 Representación de los escenarios de cálculo aplicados en la etapa de evaporación.....	80
Figura 5.3 Concentraciones de glucosa obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	82
Figura 5.4 Concentraciones de glucosa obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	83
Figura 5.5 Concentraciones de agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	84
Figura 5.6 Concentraciones de agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	85
Figura 5.7 Cantidad de vapor alimentado para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	87
Figura 5.8 Cantidad de vapor alimentado para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	88
Figura 5.9 Cantidad de vapor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	90

Figura 5.10 Cantidad de vapor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo...	91
Figura 5.11 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	93
Figura 5.12 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	94
Figura 5.13 Área en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	95
Figura 5.14 Área en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	96
Figura 5.15 Valor de x_3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	98
Figura 5.16 Valor de x_3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	99
Figura 6.1 Esquema de un tren de biorreactores de tanque agitado de operación en continuo con reciclo para la producción de bioetanol.....	102
Figura 6.2 Escenario de simulación en el que se suponen valores para las variables de entrada en el proceso para la obtención de valores de las variables de salida.....	106
Figura 6.3 Escenario de diseño en el que se fijan los valores para las nuevas variables de entrada en el proceso para la obtención de nuevos valores de las variables de salida.....	107
Figura 6.4 Campos de simulación.....	108
Figura 6.5 Campos de diseño para diferentes valores de C.....	109
Figura 6.6 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de sustrato que puede ser alimentado a un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de 0-1 1/h.....	110

Figura 6.7 Resultados de la diferencia de porcentaje de glucosa obtenida a partir de BCA entre reactores con una carga de 10% p/v de sólidos, 60 FPU con $D=0.1-1$ 1/h.....	112
Figura 6.8 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de etanol que puede ser producido de un tren de reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.....	113
Figura 6.9 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de levadura que puede ser alimentada a un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.....	115
Figura 6.10 Superficie de respuesta para la velocidad de crecimiento de levadura en un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.....	116
Figura 6.11 Superficie de respuesta para la fracción etanol/agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de $0-1$ 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo con $C=52$ g/L.....	118
Figura 6.12 Superficie de respuesta para la fracción etanol/agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de $0-1$ 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo con $C=52$ g/L.....	119
Figura 6.13 Gráficas de optimización mono objetivo para la maximización de la concentración de etanol para un reactor con operación en lote (a) y para un reactor con operación en continuo con $D=0.1$ 1/h (b).....	122
Figura 6.14 Frente de Pareto para la maximización de la concentración de etanol y minimización de la concentración de glucosa en la corriente de salida para un reactor con operación en lote (a) y para un reactor con operación en continuo con $D=0.1$ 1/h (b).....	124
Figura 6.15 Campos de búsqueda para reactor en lote.....	128
Figura 6.16 Resultados gráficos de la relación de V_{LOTE}/V_{CSTR} vs Velocidad de dilución con $P_{in}=0$ g/L para las concentraciones de levadura de 52, 30 y 25 g/L.....	129
Figura 6.17 Resultados gráficos de productividad y concentración de etanol vs velocidad de dilución con $P_{in}=0$ g/L, para concentraciones de levadura de 52, 30 y 25 g/L.....	132
Figura 7.1 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.1.....	136
Figura 7.2 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.2.....	138
Figura 7.3 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.3.....	140
Figura 7.4 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.4.....	142
Figura 7.5 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.5.....	144

Figura 7.6 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.6.....	146
Figura 7.7 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.7.....	148
Figura 7.8 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.8.....	150
Figura 7.9 Resultados gráficos de la comparación de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en lote.....	152
Figura 7.10 Resultados gráficos de la comparación de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en continuo.....	153
Figura A.1.1 Cantidad de vapor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo...	156
Figura A.1.2 Cantidad de vapor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo...	157
Figura A.1.3 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	158
Figura A.1.4 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	159
Figura A.1.5 Área en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo...	160
Figura A.1.6 Área en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	161
Figura A.2.1 Cantidad de vapor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	162
Figura A.2.2 Cantidad de vapor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	163
Figura A.2.3 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución	164

de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	
Figura A.2.4 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	165
Figura A.2.5 Área en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo...	166
Figura A.2.6 Área en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.....	167

Lista de tablas

Tabla 3.1. Balance de masa de BCA.....	24
Tabla 3.2 Composición del BCA en términos de fracción.....	25
Tabla 3.3 Composición del PCA en términos de fracción.....	25
Tabla 4.1. Análisis de grados de libertad.....	31
Tabla 4.2. Desglose de corrientes.....	36
Tabla 4.3. Desglose de corrientes para solución a explorar.....	36
Tabla 4.4. Análisis de grados de libertad para solución a explorar.....	37
Tabla 4.5. Alimentaciones en términos de concentración para la HE de BCA.....	38
Tabla 4.6. Alimentaciones en términos de concentración para la HE de PCA.....	39
Tabla 4.7. Concentraciones totales de complejo enzimático para cargas de sólidos de BCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.....	39
Tabla 4.8. Concentraciones totales de complejo enzimático para cargas de sólidos de PCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.....	39
Tabla 4.9. Concentraciones E_B y E_F para cargas de sólidos de BCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.....	40
Tabla 4.10. Concentraciones E_B y E_F para cargas de sólidos de PCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.....	40
Tabla 4.11 Valores de las variables de entrada respecto a la composición de BCA para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v.....	42
Tabla 4.12 Valores de las variables de entrada respecto a la composición de PCA para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v.....	42
Tabla 5.1 Concentración de glucosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	66
Tabla 5.2 Concentración de glucosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	67
Tabla 5.3 Concentración de xilosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	67
Tabla 5.4 Concentración de xilosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	68
Tabla 5.5 Concentración de agua (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	68

Tabla 5.6 Concentración de agua (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	69
Tabla 5.7 Vapor alimentado (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	69
Tabla 5.8 Vapor alimentado (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	70
Tabla 5.9 Vapor efecto 1 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	70
Tabla 5.10 Vapor efecto 1 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	71
Tabla 5.11 Vapor efecto 2 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	71
Tabla 5.12 Vapor efecto 2 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	71
Tabla 5.13 Vapor efecto 3 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	72
Tabla 5.14 Vapor efecto 3 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	72
Tabla 5.15 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	73
Tabla 5.16 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	73
Tabla 5.17 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	73
Tabla 5.18 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	74
Tabla 5.19 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	74
Tabla 5.20 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	75
Tabla 5.21 Área de efecto 1 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	75
Tabla 5.22 Área de efecto 1 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	76

Tabla 5.23 Área de efecto 2 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	76
Tabla 5.24 Área de efecto 2 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	76
Tabla 5.25 Área de efecto 3 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	77
Tabla 5.26 Área de efecto 3 (m ²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.....	77
Tabla 5.27 Concentraciones de glucosa deseadas para obtener en la corriente líquida al final de la evaporación.....	79
Tabla 6.1 Concentración de glucosa en la entrada con C=52, 30 y 25 g/L y Pin=0 g/L.....	111
Tabla 6.2 Concentración de etanol en la salida con C=52, 30 y 25 g/L y Pin=0 g/L.....	114
Tabla 6.3 Concentración de levadura en la entrada con C=52, 30 y 25 g/L y Pin=0 g/L.....	115
Tabla 6.4 Velocidad de crecimiento de levadura con C=52, 30 y 25 g/L y Pin=0 g/L.....	116
Tabla 6.5 Concentraciones de sustrato para diferentes C y Pin.....	127
Tabla 6.6 Concentraciones de levadura para diferentes C y Pin.....	127
Tabla 6.7 Tiempos de reacción para diferentes C y Pin.....	128
Tabla 6.8 Productividades para reactores en lote con Pin=0 g/L.....	130
Tabla 6.9 Productividades para reactores CSTR con Pin= 0 g/L.....	130
Tabla 7.1 Balances de masa para operación en lote a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU.....	135
Tabla 7.2 Balances de masa para operación en lote a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU.....	137
Tabla 7.3 Balances de masa para operación en continuo con D=0.1 1/h a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU.....	139
Tabla 7.4 Balances de masa para operación en continuo con D=0.1 1/h a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU.....	141
Tabla 7.5 Balances de masa para operación en continuo con D=0.1 1/h a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación.....	143
Tabla 7.6 Balances de masa para operación en continuo con D=0.1 1/h a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación.....	145

1. Introducción

Existe una necesidad apremiante de acelerar el desarrollo de tecnologías energéticas avanzadas para abordar los desafíos globales de la energía limpia, el cambio climático y el desarrollo sostenible (International Energy Agency, 2017).

La sociedad en la que vivimos refleja un consumo cada vez más alto de energía, los países con alto grado de pobreza muestran un consumo menor de energía en comparación con los países más ricos, y se estima que en los próximos años los países en vías de desarrollo experimentarán un aumento en su consumo de energía con mayor rapidez debido al incremento que tendrán tanto en sus poblaciones como en sus economías (International Energy Agency, 2007).

Siendo uno de los principales combustibles empleados como fuente de energía el petróleo, se ha buscado reducir su dependencia en el sector del transporte, resultando una alternativa los biocombustibles, los cuales deberán desempeñar un papel importante en la sustitución de los combustibles fósiles líquidos adecuados para vehículos, aviones, embarcaciones marinas y otros modos de transporte pesado que no pueden ser utilizados

1.1 Escenario energético y biocombustibles

La producción y el uso de biocombustibles puede proporcionar beneficios, como una mayor seguridad energética, al reducir la dependencia de las importaciones de petróleo y la volatilidad de los precios del petróleo. Además, los biocombustibles pueden apoyar el desarrollo económico mediante la creación de nuevas fuentes de ingresos en áreas rurales.

Las políticas de apoyo a los biocombustibles a menudo están impulsadas por preocupaciones de seguridad energética, junto con el deseo de sostener el sector agrícola y revitalizar la economía rural. Más recientemente, la reducción de las emisiones de CO₂ en el sector del transporte se ha convertido en un motor importante para el desarrollo de biocombustibles, particularmente en países que pertenecen a la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE). Una de las medidas de apoyo más comunes es un mandato

Introducción

combinado, que define la proporción de biocombustible que debe usarse en el combustible de transporte (por carretera), a menudo combinado con otras medidas, como incentivos fiscales. Más de 50 países, incluidos varios países que no pertenecen a la OCDE, han adoptado objetivos o mandatos combinados y varios más han anunciado cuotas de biocombustibles para los años futuros.

Como resultado, la producción mundial de biocombustibles creció de 16 mil millones de litros en 2000 a más de 100 mil millones de litros en 2010. Hoy en día, los biocombustibles proporcionan alrededor del 3% del combustible total para el transporte por carretera a nivel mundial (en términos energéticos) y se logran cuotas considerablemente más altas en ciertos países. Brasil, por ejemplo, satisfizo cerca del 21% de su demanda de combustible para el transporte por carretera en 2008 con biocombustibles. En los Estados Unidos, la proporción era del 4% del combustible para el transporte por carretera y en la Unión Europea (UE) alrededor del 3% en 2008.

Los biocombustibles comenzaron a producirse a fines del siglo XIX, cuando el etanol se derivaba del maíz y el primer motor de Rudolf Diesel funcionaba con aceite de maní. Hasta la década de 1940, los biocombustibles eran vistos como combustibles de transporte viables, pero el bajo costo de los combustibles fósiles detuvo su desarrollo. El interés en la producción comercial de biocombustibles para el transporte aumentó nuevamente a mediados de la década de 1970, cuando el etanol comenzó a producirse a partir de la caña de azúcar en Brasil y luego del maíz en los Estados Unidos. En la mayor parte del mundo, el crecimiento más rápido en la producción de biocombustibles ha tenido lugar en los últimos 10 años, respaldado por políticas gubernamentales ambiciosas.

Las políticas de apoyo a los biocombustibles a menudo están impulsadas por preocupaciones de seguridad energética, junto con el deseo de sostener el sector agrícola y revitalizar la economía rural. Más recientemente, la reducción de las emisiones de CO₂ en el sector del transporte se ha convertido en un motor importante para el desarrollo de biocombustibles, particularmente en países que pertenecen a la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE). Una de las medidas de apoyo más comunes es un mandato combinado, que define la proporción de biocombustible que debe usarse en el combustible de transporte (por carretera), a menudo combinado con otras medidas, como incentivos fiscales. Más de 50 países, incluidos varios países que no pertenecen a la OCDE, han adoptado objetivos o mandatos combinados y varios más han anunciado cuotas de biocombustibles para años futuros. La disponibilidad de la biomasa ha despertado el interés para su uso como materia prima para la producción de biocombustibles. Para que estos puedan ser deseables deben ser líquidos de preferencia, altamente combustibles, pero no explosivos, poseer una alta concentración de energía, estables en almacenamiento por largos períodos, transportables vía tubos o ductos y baratos.

1.2 Tipos de biocombustibles

La clasificación de biocombustibles presentada en este trabajo es de acuerdo con la materia prima de la cual provienen, teniendo como pioneros a los biocombustibles de primera generación, los cuales son producidos de biomasa con altos contenidos de azúcares, amidas y aceites de una parte específica, que comúnmente resultan ser fuentes alimenticias provenientes de plantas tradicionales, entre las que se pueden encontrar la caña de azúcar, trigo, maíz, palma aceitera y soya. Entre algunos biocombustibles de primera generación, se encuentran el bioetanol y biodiesel, los cuales se producen y comercializan a nivel industrial en cantidades significativas por diversos países. Pese al gran beneficio que se obtiene como fuente de energía, existe una gran polémica debido a que la materia prima es una fuente alimenticia para el ser humano.

Los biocombustibles de segunda generación son producidos a partir de materias primas no alimenticias como residuos agroindustriales y gramíneas forrajeras, es decir, son combustibles renovables producidos con base a cualquier biomasa lignocelulósica. Entre los que se pueden encontrar el bioetanol, hidrógeno, metanol, DME, aceites, biobutanol, biometano, ETBE, por mencionar algunos. Los biocombustibles de tercera generación son obtenidos a través de la utilización de algas verdeazuladas, que son organismos unicelulares procariontas y autotróficos que llevan a cabo la fotosíntesis oxigénica y acumulan glucógeno (azúcar) como la forma principal de carbono almacenado. El metabolismo del alga verdeazulada es mejorado con el fin de crear una vía nueva para la utilización y fijación de carbono que resulta en la síntesis de biocombustibles. En la Figura 1 puede apreciarse de forma esquemática la clasificación de los biocombustibles, así como algunos biocombustibles que pueden ser obtenidos de las fuentes de biomasa representadas.

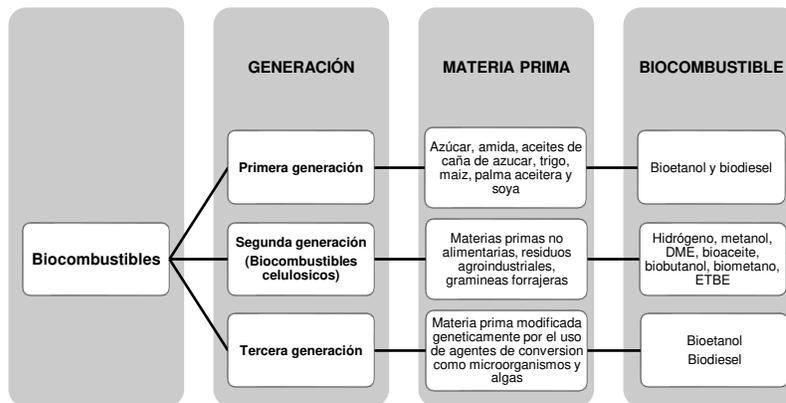


Figura 1.1 Clasificación de biocombustibles respecto a la materia prima.

1.2.1 Tipos de biorefinería-procesos en biorefinerías

Debido a que existe una vasta gama de biocombustibles y productos químicos de valor agregado que pueden ser obtenidos de la biomasa, han surgido diversas investigaciones que plantean procesos de producción en conjunto, ya sea de forma consecutiva o en paralelo para obtener los bioproductos deseados a partir de una materia prima específica, es decir, una biorrefinería.

El concepto de biorrefinería es análogo al concepto básico de las refinerías de petróleo convencionales: producir una variedad de combustibles y otros productos a partir de una determinada materia prima. La competitividad económica de la operación se basa en la producción de coproductos de alto valor y bajo volumen, además de biocombustibles de bajo valor comparable. Se pueden definir dos categorías principales: biorefinerías impulsadas por la energía, que incluyen plantas de biocombustibles, y biorefinerías impulsadas por productos, que se centran en la producción de alimentos, productos químicos y otros materiales y pueden generar energía o calor como coproductos (Jong y Ree, 2009).

Las biorefinerías pueden hacer uso de una variedad más amplia de materias primas de biomasa y permitir un uso más eficiente de los recursos que las unidades de producción de biocombustibles actuales, y reducir la competencia entre los diferentes usos de la biomasa.

La IEA Bioenergy Task 2010 toma en cuenta la complejidad del concepto de biorefinería y su evolución debido al desarrollo de nuevas tecnologías para realizar la clasificación de las biorefinerías, la cual se basa en cuatro conceptos fundamentales provenientes de esta, que son (Cherubini y col. 2009):

- La materia prima empleada (cultivos, residuos agrícolas, algas).
- Los productos intermedios (azúcares C5, aceite de pirólisis o gas de síntesis).
- Los productos finales obtenidos (energía o productos químicos).
- El proceso utilizado.

Esta clasificación tiene la ventaja de contabilizar la necesidad de aplicar una tecnología dada a diferentes materias primas. Las biorefinerías no deben ser diseñadas de forma genérica, pero deben adaptarse a la mejor tecnología y a la mejor materia prima disponible en una ubicación geográfica elegida. Debido al auge de la investigación sobre las biorrefinerías, en los últimos años se ha venido introduciendo el concepto de biorrefinería integrada, pudiendo definirse como una instalación de procesamiento que integra múltiples tecnologías de conversión de biomasa para producir diversos productos bioquímicos, biocombustibles y bioenergía (Ng y col. 2013).

Introducción

Hoy en día existe una gran variedad de tecnologías de conversión de biocombustibles avanzadas y convencionales. Los procesos convencionales de biocombustibles, aunque ya están disponibles comercialmente, continúan mejorando en eficiencia y economía. Las rutas de conversión avanzadas se están moviendo a la etapa de demostración o ya están allí.

La biomasa puede ser convertida en diferentes clases de compuestos con propiedades diferentes, dependiendo de los procesos involucrados la conversión de biomasa puede ser: termoquímica y bioquímica. La elección del proceso de conversión depende del tipo y cantidad de biomasa disponible, de la forma de energía deseada, de su uso final, normas ambientales, factores económicos y factores específicos del proceso.

La conversión termoquímica se basa en la utilización de calor como fuente de transformación, los principales procesos involucrados en dicha conversión son la licuefacción, pirólisis y gasificación.

La conversión bioquímica, como su nombre lo indica se basa en la combinación de procesos bioquímicos para la obtención de biocombustibles y productos de valor agregado, siendo los principales procesos la fermentación y la hidrólisis enzimática, pero también se tienen otros como la hidrólisis ácida y alcalina. En la Figura 2 se pueden apreciar los procesos que se llevan a cabo en las rutas de conversión termoquímica y bioquímica, así como los productos intermedios y finales que se pueden obtener a través de los procesos y la combinación de estos.

1.2.1 Síntesis de biorefinerías

La síntesis de las biorefinerías es la integración de un amplio espectro de tecnologías de conversión de biomasa para producir una amplia gama de productos a través de las vías más eficaces (Tay y col. 2013).

Existen numerosos trabajos donde se busca desarrollar una biorrefinería, por lo que surge la necesidad de tener una metodología capaz de evaluar los procesos involucrados con el fin de identificar los posibles productos a ser obtenidos a partir de biomasa, así como las mejores rutas de síntesis para la producción de ellos. Hay muchas tecnologías potenciales de conversión de biomasa y vías disponibles (p. ej. Figura 2), por lo tanto, hay una necesidad de detectar todas las vías posibles y determinar la vía óptima que permita obtener los productos deseados. Se considera que el desarrollo de un procedimiento sistemático para la síntesis de una biorrefinería todavía se encuentra en su etapa temprana (Chemmanattuvalappil y Ng 2013).

Introducción

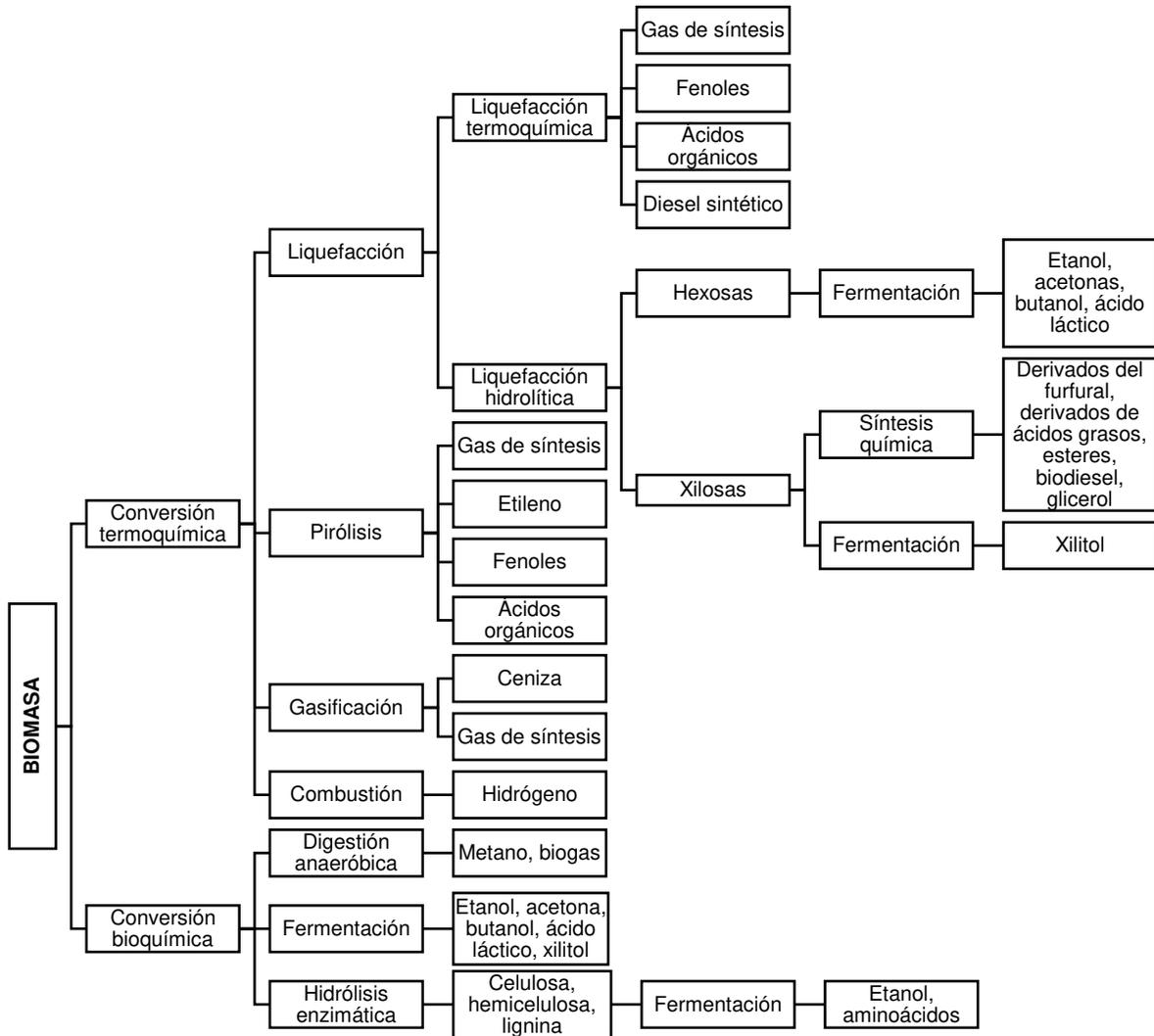


Figura 1.2 Rutas de conversión de biomasa.

1.2.2 La modelación matemática en las biorefinerías

Problemas como el diseño de una biorrefinería, determinar el número de unidades para una tarea específica, la asignación de las materias primas a los diferentes bioprocesos de producción y decidir los objetivos de planificación de la producción o los objetivos de la producción son algunos de los problemas que se pueden resolver a través de modelos matemáticos. En otras palabras, las formulaciones matemáticas se utilizan para tomar decisiones en diferentes niveles, desde la síntesis y el diseño del proceso hasta su operación y programación (Corsano y col. 2009).

Introducción

En el proceso de síntesis se determina la estructura de la planta, satisfaciendo un conjunto de restricciones y especificaciones. Es decir, una vez que las entradas de problemas (volumen de alimentación y la composición, por ejemplo), las tareas y los productos deseados se han especificado, el problema de síntesis determina la selección óptima de los equipos y sus interconexiones que transforman las entradas a los productos finales. Dentro de este marco, el problema de diseño se ocupa del dimensionamiento de los equipos y unidades de almacenamiento. La optimización de la planta se puede realizar con factores de tamaño y tiempos de funcionamiento como parámetros constantes en los modelos más simples o como variables dependientes de proceso en modelos más detallados.

Por lo anterior, la motivación del uso de modelos matemáticos para realizar optimización viene del hecho de que un pequeño aumento en la eficiencia de la operación de una planta de biorefinación puede ser transmitida en beneficios. En las operaciones, una característica distintiva es obtener altos rendimientos diarios, si una planta puede ser modelada de tal manera que las entradas para la planta dan salidas que pueden ser limitadas por programas de simulación, entonces, un mejor conjunto de entradas se puede obtener utilizando un programa con un modelo matemático que calcule el mejor conjunto de salidas de la planta, denominando a este como el problema de optimización.

En el trabajo desarrollado por Nawaz y col. (2011) se desarrollaron modelos que se pueden utilizar para calcular las rutas óptimas para la producción de etanol, butanol, ácido succínico y sus mezclas con gasolina, donde la función objetivo puede ser la maximización de la producción de estos productos químicos, la minimización de los residuos producidos y el costo, se tienen diferentes pasos de procesamiento que son definidos como intervalos y cada intervalo se divide en etapas posteriores que contienen diferentes operaciones como la separación, la reacción y la mezcla.

También se ha venido trabajando en el concepto de superestructura de biorefinerías, como es el caso de Rizwan y col. (2015) donde se desarrolla la superestructura de una biorefinería en base a datos de proceso únicamente aplicables a materias primas específicas y considerando el hecho de que cada materia prima específica e intermediarios en el proceso tienen un conjunto de datos de proceso específicos, iniciando por el pretratamiento hasta los productos finales. El proceso de síntesis es reconocido como una poderosa herramienta para generar procesos de costo efectivo para la producción de productos a partir de biomasa, con una alta eficiencia de conversión. A pesar de algunas contribuciones enfocadas en el diseño óptimo de configuraciones de biorefinerías, podría decirse que un marco de modelado se refiere a la integración de los procesos de producción con procesos secundarios de una forma coherente, por ejemplo, la incorporación de un número de tecnologías alternativas potenciales disponibles para el pretratamiento y conversiones futuras de materia prima en biocombustibles y otros productos de valor agregado.

Introducción

Al hacer uso de modelos matemáticos se han planteado problemas de optimización, como es el caso de Chemmangattuvalappil y Ng (2013), donde el problema de optimización está formulado para identificar el conjunto de productos bioquímicos promisorios que cumplan con los atributos que los clientes buscan e identificar las rutas de reacción más prometedoras.

En Ng y col. (2013) se desarrollaron marcos sistemáticos de una biorrefinería en la asignación óptima del producto y optimización de la producción, cabe señalar que el trabajo de investigación fue desarrollado en la síntesis de una biorrefinería integrada sostenible considerando funciones objetivo diferentes: impacto ambiental total, impacto total de la seguridad e impacto total en salud.

En otros trabajos se introduce incertidumbre en la optimización para diversas síntesis y problemas de diseño de procesos, tales como la programación estocástica, la programación robusta y la programación difusa como es el caso de Tay y col. 2013, donde se estudió un proceso de síntesis y diseño a través de optimización en el que se incluyeron incertidumbres a largo plazo sobre la vida útil de una biorrefinería integrada, tales como el suministro de biomasa y productos de la demanda. Se empleó un modelo matemático basado en el balance de materia de la biorrefinería, el modelo se amplió para incluir la consideración de la incertidumbre del suministro de biomasa y productos de la demanda. Teniendo como caso de estudio una planta de celulosa y papel en una biorrefinería integrada, en la cual se obtenía gas de síntesis generado a través de una gasificación que luego puede ser utilizada en un ciclo combinado para generar electricidad y vapor a través de una turbina de gas.

Otros trabajos como el de Geraili y Romagnoli (2015) formulan un modelo donde los sistemas de proceso más importantes son representados como cajas negras lineales, las ecuaciones incluyen aproximaciones lineales de los balances de masa y energía para cada nodo en la cadena de suministro, los rendimientos de producción para cada sección de la planta fueron obtenidos de la literatura y usados como entradas en el modelo de planeación estratégica, y los valores presentes netos esperados (función objetivo) de la biorefinería fueron maximizados considerando la optimización de la capacidad de producción (variables de decisión). Tomando como caso de estudio se tuvo una biorefinería lignocelulósica que usa una fermentación basada en una plataforma de conversión de azúcar, con tres productos, etanol celulósico, ácido succínico y electricidad, donde se empleó pasto como materia prima para el proceso de biorefinación.

El proceso de producción de bioetanol también ha sido estudiado como uno de los productos de las biorrefinerías, uno de estos desarrolla el modelo de una biorrefinería completa que se puede utilizar para calcular rutas óptimas de producción de etanol, butanol y ácido succínico, y sus mezclas con gasolina para maximizar el rendimiento o reducir al mínimo los residuos o los costos, para ello se realizaron balances de componentes basados en la estequiometría de la reacción, la fracción de los reactivos transformados, la cantidad de productos químicos que se

Introducción

consumen, los pesos moleculares de los componentes, las cantidades producidas de residuos y la separación necesaria de factores (Zondervan y col. 2011). En Furlan y col. (2012) se tiene como caso de estudio el uso de infraestructuras basadas en las plantas brasileñas de bioetanol a partir de caña de azúcar, haciendo uso de modelos estequiométricos, utilizando este caso como base para analizar los precios de venta de etanol, energía eléctrica excedente, bagazo, levadura, así como los costos de las enzimas y la caña de azúcar. Por otro lado, al tener más información sobre el proceso de producción de bioetanol, algunos investigadores buscan integrar el proceso de producción de etanol de primera generación con segunda generación.

Existen trabajos donde se realiza un análisis técnico, económico y ambiental de diferentes configuraciones de biorrefinería, considerando la integración de diferentes tecnologías de biomasa con plantas de azúcar y etanol, como es el caso de Furtado y col. (2019), empleando rutas bioquímicas para la producción de etanol lignocelulósico y biobutanol a partir de la fermentación ABE (acetona-butanol-etanol), en dicho trabajo se empleó un proceso termoquímico para la producción de gas de síntesis. Para la solución de problemas se utilizó modelado matemático para simplificar los tiempos de cómputo, para ello se tomó como caso de estudio un ingenio azucarero con una capacidad de procesamiento de 6 millones de toneladas de caña de azúcar por cultivo, o 1200 t/h (toneladas de caña de azúcar por hora), y altos parámetros de vapor (100 bar y 520° C) contando con una planta de cogeneración. Ya que la planta planteada es a partir de caña de azúcar, se utilizó bagazo de caña de azúcar como materia prima para la producción de bioetanol de segunda generación, contando con un pretratamiento ácido y vapor a 37 bar, para después pasar a una hidrólisis enzimática en reactores discontinuos con cargas de 5% de sólidos, continuando con la fermentación con una conversión de 95% de hexosas. Aprovechando la lignina que se obtiene en la hidrólisis enzimática para llevar a cabo el proceso de cogeneración.

Otros trabajos como el de Walter y Ensinas (2008), sugieren que después de realizarse la sacarificación, en el caso de su trabajo hidrólisis enzimática, la solución debe purificarse y concentrarse. También se han realizado estudios sobre trenes de reactores, como es el caso de la fermentación continúa desarrollada por Andrietta y Maugeri y col. (1994), a través de modelación matemática y simulaciones previas basadas en las condiciones de operación de las destilerías brasileñas, la cual fue implementada en la destilería Guarani en 1992 con una producción de 500 m³/día, y en Costa Pinto en 1996 con 1300 m³/día.

Por lo anterior, y debido a la cantidad de rutas a seguir, además de la combinación de las mismas, existe un nicho de oportunidad referente a la síntesis de biorrefinerías, ya que como se ha visto son varios los objetivos que pueden tomarse en cuenta cuando se esté sintetizando la biorrefinería, obteniendo así una gama infinita de opciones, siendo una de las principales las biorrefinerías que producen bioetanol.

Introducción

El atractivo de los prospectos futuros para las biorefinerías está acompañado por varias características únicas y desafiantes, como ya se ha mencionado previamente en este trabajo, por lo que, en otros escenarios, las estrategias de síntesis de proceso exitosas para refinerías convencionales no funcionan para biorefinerías. Siendo así, que la síntesis de biorefinerías usa aproximaciones de sistemas de ingeniería avanzados que requieren de una búsqueda de información y aplicación sustancial de modelos matemáticos para el diseño y optimización de biorrefinerías.

Si bien existen muchos trabajos sobre la creación y aplicación de metodologías para la síntesis de biorrefinerías, en la mayoría de la bibliografía consultada hasta ahora, existen pocos trabajos que tomen en cuenta las cinéticas y las dinámicas de los procesos involucrados para la producción de biocombustibles y productos de valor agregado.

Cabe destacar que los trabajos que emplean cinéticas en sus modelos matemáticos seleccionan los aspectos significativos del sistema y estos deben ser incluidos, ya que permiten que el modelo se aproxime más al proceso real que en comparación con los trabajos que emplean modelos matemáticos basados sólo en rendimientos o modelos de tipo caja negra.

1.2.3 Situación actual de los bioprocesos: Caso Inbicon

Inbicon es una empresa danesa que produce etanol celulósico, ubicada en Kalundborg, la cual ha desarrollado tecnologías para tener una operación industrial continua, se afirma que estas pueden ser desplegadas a escala comercial, como por ejemplo el Concepto de Energía Maabjerg, en Dinamarca, un proyecto que incorpora una planta de etanol celulósico a escala completa con una capacidad de 80 millones de litros por año, así como en varios otros proyectos en todo el mundo. Entre los productos que se introducen son:

- Etanol celulósico para el reemplazo de gasolina o el reemplazo de etanol de cultivo
- Melaza C5 para impulsar las plantas de producción de biogás
- Pellets de lignina para reemplazar el carbón

El etanol celulósico ha sido caracterizado y su aplicabilidad como alternativa al etanol convencional se ha demostrado en pruebas de motor.

1.2.3.1 Características de la tecnología principal

La hidrólisis enzimática se considera actualmente como la tecnología más prometedora para convertir la biomasa lignocelulósica en azúcares. La celulosa se convierte en bioetanol, lignina en un combustible sólido de alta calidad y la hemicelulosa en melazas de alimentación, producción adicional de etanol u otros productos valiosos.

Introducción

El proceso Inbicon es un proceso probado para la conversión de biomasa lignocelulósica en bioetanol. Es una tecnología continua y de eficiencia energética desarrollada para el pretratamiento y la licuefacción de biomasa lignocelulósica, que ha estado operando y optimizándose a escala piloto durante cinco años con resultados prometedores.

La tecnología de Inbicon tiene varias ventajas:

- Opera con altas concentraciones de materia seca (25-40%)
- Produce una alta concentración de etanol de aproximado de 10% v/v en el líquido de fermentación (caldo).
- Requiere una energía relativamente baja, en parte debido al alto proceso de materia seca y debido a las soluciones integradas de energía
- No se agregan catalizadores o productos químicos, solo vapor, enzimas y levadura.

1.2.3.2 Desarrollo gradual de laboratorio a escala de demostración

La tecnología de Inbicon se ha desarrollado en pasos de más de 10 años. Desde la escala de laboratorio en dos plantas piloto y finalmente llevarlo a la escala de 4 t/hora de biomasa a etanol demostrada en Kalundborg. Este desarrollo ha producido un proceso robusto capaz de producir cantidades sustanciales de etanol a partir de biomasa celulósica como paja y otros residuos, que ahora está lista para su despliegue comercial.

1.2.3.3 La planta de demostración

La planta de demostración de Inbicon puede convertir 4 toneladas de paja de trigo por hora en tres productos: etanol 2G, melazas C5 y gránulos de lignina. Una visión general del proceso en la planta de demostración se explica a continuación.

Primero, las pacas de paja de trigo se preparan para el pretratamiento mediante un sistema automático que elimina las cuerdas de las pacas, afloja la estructura compacta de las pacas y corta la biomasa en pedazos. El contenido de materia seca se ajusta luego con el condensado del evaporador que contiene ácido acético antes del pretratamiento.

Durante el pretratamiento hidrotérmico, la biomasa se calienta a 180-200° C durante 10-20 minutos con vapor. Durante el pretratamiento, parte de la hemicelulosa se disuelve y se solubiliza y la lignina se reordena en la superficie de la celulosa haciendo que la celulosa sea más accesible para la hidrólisis enzimática. Después del pretratamiento, la paja pretratada se separa en fibras y líquido. Las fibras se lavan, se enfrían y el pH se ajusta antes de que se agreguen las enzimas.

Introducción

La hidrólisis enzimática se lleva a cabo con preparaciones de celulasa comerciales en la aplicación, después las fibras licuadas se bombean desde el reactor de hidrólisis a través de un intercambiador de calor (enfriado a aproximadamente 33° C) hasta la primera parte de la fermentación donde se agrega levadura seca comercial. La levadura utilizada en la versión 1 (versión original) solo convierte los azúcares C6 en bioetanol: los azúcares C5 (principalmente xilosa) no se convierten en bioetanol. La hidrólisis y la primera parte de la fermentación tienen lugar en fermentadores horizontales diseñados para manejar la viscosidad de las fibras licuadas, para las fermentaciones se empleó levadura industrial la cual no está especificada por la empresa.

Después de la primera parte de la fermentación, el caldo de fermentación se bombea a fermentadores verticales estándar para la última parte de la fermentación, que dura la aplicación, 120 h. La alta hidrólisis y fermentación de la materia seca da como resultado concentraciones de etanol superiores a 5% de fracción de masa o hasta 10% de fracción de volumen en el caldo de fermentación.

Después de la fermentación, el etanol se elimina del caldo de fermentación en un separador al vacío para evitar que la temperatura desnaturalice las enzimas. El etanol se concentra primero en una columna rectificadora y luego en un tamiz molecular para alcanzar al menos 98.7% de etanol y menos de 0.3% de agua.

El producto del fondo de la columna de destilación se separa y los sólidos se secan y pelletizan en gránulos de lignina, que se utilizan para generar calor y energía para el proceso y para reemplazar el carbón en las centrales de calor y energía danesas. El líquido de la separación contiene algunos azúcares C5 y partes de las celulasas. Parte del líquido se recicla a la hidrólisis para reutilizar las enzimas y el resto se mezcla con el líquido del pretratamiento y se evapora en una melaza C5 que contiene la mayoría de los azúcares C5 de la paja de trigo. El condensado de la evaporación se usa para ajustar el contenido de materia seca de la paja de trigo antes del pretratamiento.

1.2.3.4 Procesamiento continuo

Se considera que el procesamiento de biomasa en toneladas por hora requerido para el despliegue industrial requiere un procesamiento continuo cuando sea factible, ya que se espera que una planta que funcione en lotes sea demasiado costosa, especialmente en el paso de pretratamiento donde la densidad es baja en la entrada. Por lo tanto, ha sido el objetivo en Inbicon desarrollar un proceso continuo que trabaje con alta materia seca. El alto procesamiento de materia seca también se considera un factor clave para la economía de proceso.

Introducción

Desde el paso de preparación hasta el paso de fermentación horizontal, el proceso de Inbicon ha demostrado un funcionamiento continuo. El tiempo de residencia en el proceso continuo es de entre 30 y 40 h. Las 100 h restantes de tiempo de proceso se llevan a cabo en modo discontinuo convencional en fermentadores verticales.

1.2.4 Problemática del uso de modelos matemáticos en la síntesis de biorefinerías

La complejidad de los procesos mencionados revela la necesidad de sintetizar una biorrefinería que emplee modelos matemáticos que describan cada una de las etapas del proceso de forma particular, y que además puedan apoyar una multitud de tareas estratégicas, tácticas y operativas mediante la integración de las no linealidades que intervienen en los procesos de producción.

Como se pudo observar en las secciones anteriores, existe un auge significativo en la investigación y desarrollo de procesos de aprovechamiento de biomasa, principalmente en la producción de biocombustibles, entre ellos uno de los más conocidos es el bioetanol por ser uno de los pioneros y encabezar la producción a nivel mundial.

Siguiendo una cadena de aprovechamiento de diferentes biomasa lignocelulósicas, se podría decir que una biorefinería está conformada por cierta cantidad de bioprocesos básicos unitarios. Dichos procesos se pueden concatenar y combinar de diversas formas para conformar una biorefinería.

En la literatura existe una gran cantidad de investigaciones sobre síntesis de biorefinerías como las citadas previamente en este trabajo, sin embargo, la mayor parte de los trabajos revisados hasta ahora, se basan en modelos matemáticos que solo describen el rendimiento del producto por unidad de material alimentado durante el bioproceso, o dicho de otra forma modelos de caja negra, por lo que el considerar sólo el rendimiento implica que el proceso o equipo lleva a cabo la conversión total de la biomasa alimentada, y esto ocurre sólo típicamente en operaciones en lote, y otros casos como el de Inbicon en el que se menciona la importancia de trabajar con procesos en continuo, siendo un nicho de investigación el diseño de la mejor ruta de proceso para la producción de etanol lignocelulósico.

Si se quisieran sintetizar plantas con procesos operados en continuo, la información de rendimientos de la materia prima no resulta ser suficiente, por ello, para los fines del presente trabajo, se tomará como base la investigación desarrollada en los estudios de maestría Peñaloza (2014), donde se estudió la dinámica de una biorreactor para la producción de bioetanol de primera generación, en el cual la operación se lleva a cabo de forma continua

Introducción

permitiendo el manejo de altos volúmenes de materia prima, trayendo como consecuencia que la corriente de salida contenga una mínima concentración de azúcares reductores remanentes.

En dicho trabajo, se realizaron problemas de simulación y diseño para comprender cómo interactúan las variables involucradas en la etapa de fermentación para diferentes escenarios de operación, con lo que se obtuvo un diseño óptimo del proceso para producir de bioetanol de primera generación. Se tomó como referencia principal los trabajos del grupo de investigación de Filho (Andrietta (1994), Andrietta y Maugeri (1994), Meleiro y Filho (2000), Cordeiro (2005), y Viegas et al. (2002)). En donde, Andrietta (1994) construyó un modelo matemático del proceso de fermentación tomando como caso de estudio un proceso fermentativo en escala industrial, el cual permite operar una planta en una región óptima.

Siendo un primer paso de la optimización la etapa de fermentación, para que, dadas condiciones de salida deseables, se obtuvieran los valores de las variables de entrada para los cuales se consiguiera una corriente de salida con una máxima concentración de etanol, pero con el consumo total de sustrato para un reactor de tanque agitado en operación continua. Para obtener esto, el modelo matemático empleado describía la fermentación de glucosa a etanol en un reactor de escala industrial. Cabe mencionar que esto concierne únicamente a la etapa de fermentación, y que para la síntesis de una biorefinería es necesario tomar en cuenta todas las etapas de proceso involucradas en la producción de biocombustibles o productos químicos de valor agregado. Debido al alto nivel de detalle que se requiere para describir los procesos donde interactúan microorganismos, grandes cadenas de polisacáridos y la complejidad de las reacciones químicas que se llevan a cabo, así como la fenomenología, es difícil encontrar modelos matemáticos que describan todas las etapas involucradas en el proceso de producción. Por lo que nuevamente, existe una gran cantidad de trabajos donde se emplean modelos de rendimiento, y dichas etapas son vistas como cajas negras, donde si bien es posible obtener resultados, estas etapas también son un nicho de investigación, ya que al emplear modelos matemáticos que tomen en cuenta toda la fenomenología implicada, será posible obtener una descripción más real de lo que ocurre en un proceso de producción de biocombustibles y productos químicos de valor agregado.

Por otro lado, al contar con modelos matemáticos que describan las vías de procesamiento, se facilitará la optimización del proceso que se esté estudiando, ya que estas rutas podrán evaluarse y podrá encontrarse el óptimo, o dado el caso, el conjunto óptimo, del sistema real sin experimentar directamente con el sistema real. Dentro de este marco de optimización también es necesario tomar en cuenta los alrededores del proceso, ya que por mencionar un ejemplo, si se fermentaran azúcares provenientes de biomasa, solo se tendría una determinada concentración de azúcar a fermentar en la corriente de entrada o como concentración inicial, por lo cual, tendría que optimizarse el proceso de fermentación

Introducción

tomando en cuenta los límites de un proceso anterior, y probablemente los de un proceso posterior, además de las posibles combinaciones y concatenaciones que se den entre las etapas de procesamiento de una biorefinería.

Por todo ello, es necesario emplear modelos matemáticos que tomen en cuenta las fenomenologías y alrededores de las etapas de proceso involucradas en los procesos de producción de biocombustibles y productos químicos de valor agregado, que se deseen obtener como productos finales y secundarios en una biorefinería, los cuales permitirán obtener aproximaciones más reales y como consecuencia una mejor visualización de las implicaciones de operación del proceso, pero sobre todo, obtener un aprovechamiento máximo la biomasa lignocelulósica empleada como materia prima.

1.3 Hipótesis

Mediante la aplicación de modelos matemáticos que toman en cuenta las cinéticas para etapas de procesamiento involucradas en una biorefinería de segunda generación para la producción de bioetanol, se puede determinar una configuración de biorefinería con las mejores condiciones de operación que proporcionen la mayor fracción etanol/agua.

1.4 Objetivo

Identificar las mejores condiciones de operación de una biorefinería a partir de bagazo y paja de caña de azúcar, empleando modelos matemáticos en las etapas de procesamiento tomando a consideración la cinética de los procesos, en la producción de bioetanol de segunda generación.

1.4.1 Objetivos específicos

- Aplicar modelos matemáticos seleccionados para simular y diseñar las etapas de procesamiento para la producción de bioetanol de segunda generación.
- Simular y diseñar la etapa de sacarificación en lote y continuo bajo diferentes condiciones de operación mediante la aplicación del modelo matemático seleccionado a través de la estrategia “Brutish Scanning”.
- Determinar la mejor materia prima para llevar a cabo la sacarificación en cuanto a producción de azúcares reductores fermentables.

Introducción

- Simular y diseñar la etapa de evaporación en lote y continuo bajo diferentes condiciones de operación mediante la aplicación del método seleccionado a través de la estrategia “Brutish Scanning”.
- Determinar la mejor materia prima para llevar a cabo la evaporación en cuanto a concentración de azúcares reductores fermentables.
- Simular y diseñar la etapa de fermentación en lote y continuo bajo diferentes condiciones de operación mediante la aplicación del modelo matemático seleccionado a través de la estrategia “Brutish Scanning”.
- Determinar la mejor materia prima para llevar a cabo la fermentación en cuanto a fracción etanol/agua.
- Optimización de la etapa de fermentación en lote y continuo bajo diferentes condiciones de operación mediante la aplicación del modelo matemático seleccionado a través de la estrategia “Algoritmos genéticos”.
- Diseño de biorefinerías en operación en lote a partir de bagazo y paja de caña de azúcar.
- Diseño de biorefinerías en operación en continuo a partir de bagazo y paja de caña de azúcar.
- Diseño de biorrefinería con fermentación integrada a partir de bagazo y paja de caña de azúcar.
- Determinación de la mejor configuración de biorefinería con los resultados obtenidos.

1.5 Justificación

En el aprovechamiento de biomasa lignocelulósica para la producción de etanol de segunda generación, en la literatura abierta se pueden encontrar un gran número de configuraciones de biorefinerías. Todas ellas construidas de diferente manera, en cuánto a los modelos matemáticos utilizados como a las técnicas de optimización. Esto, también debido a la diversidad de materias primas y biorreactivos utilizados tratando de describir las rutas de procesamiento para obtener una aproximación más real, pero debido a la complejidad y a la infinidad de combinaciones y problemas que se derivan de las mismas, existe un enorme nicho de investigación en lo referente a la síntesis de biorefinerías.

Generalmente, lo que se propone es una estructura de la planta y, a través de alguna técnica de optimización, se determina el número de equipos, sus dimensiones y condiciones. Todo ello, dependiendo del tipo de información con que se cuenta, en el sentido de que algunos sólo utilizan el rendimiento que se tiene de cada proceso en particular y otros manejan modelos dinámicos.

La modelación reduce potencialmente el costo del desarrollo de los procesos involucrados por la eliminación de trabajo experimental innecesario, ya que permite el estudio de diversas

Introducción

interacciones de los parámetros del proceso a través de la simulación. De los trabajos revisados hasta ahora, donde se presentan diversas configuraciones y vías de procesamiento, no es posible decir cuál de las presentadas es la mejor, por cual es necesario explorar cual es la mejor configuración para una biorefinería integrada de BCA y PCA bajo un mismo criterio de diseño. Esto, con base en la misma información: modelos matemáticos que describan las etapas del proceso de forma particular.

1.6 Organización de la tesis

Esta tesis en la que se aborda el problema del diseño de una biorefinería integrada para la producción de bioetanol de segunda generación a partir de dos biomásas, BCA y PCA se organiza de la siguiente manera: en este primer capítulo introductorio se justifica y se motiva el problema; en el segundo capítulo se describe la conceptualización de la biorefinería a partir de un estudio por separado de biorefinerías en operación en lote y continuo a partir de BCA y PCA, mostrando todas las etapas que están involucradas en el proceso de producción.

En el tercer capítulo, se expone la primera etapa de procesamiento que es el pretratamiento, explicando cómo se llevan a cabo los procesos involucrados para el BCA y PCA respectivamente, así como balances de masa en términos de concentración. En el cuarto capítulo, se describe el modelo matemático para la etapa de sacarificación por hidrólisis enzimática, así como las simulaciones que se realizaron en los diferentes escenarios obtenidos de las combinaciones de carga de sólidos, concentraciones de complejo enzimático y velocidades de dilución, permitiendo visualizar cómo se comporta dicho proceso tanto para el BCA como para el PCA.

En el quinto capítulo, se describen los cálculos hechos para la simulación y diseño de la etapa de evaporación para concentrar los azúcares reductores que serán posteriormente fermentados para la obtención de bioetanol, esto tomando cada uno de los resultados de las concentraciones obtenidas de la hidrólisis enzimática, para diferentes contenidos de sólidos en la corriente de líquido concentrado.

En el sexto capítulo, se describe el sistema de fermentación que es objeto de estudio, así como el modelo matemático que describe su comportamiento y que es base para realizar el estudio, también se realizaron varias simulaciones para visualizar el comportamiento del proceso, se obtuvieron los valores de las variables de entrada que llevan el proceso a un diseño óptimo, también se realizó la optimización del procesos fermentativo por “Algoritmos genéticos”, cuyos resultados coinciden con los valores obtenidos del diseño realizado previamente, y que se reportan mediante superficies de respuesta para visualizar cómo interactúan las variables de entrada y de salida.

Introducción

En el séptimo capítulo, se integran los resultados de cada una de las etapas estudiadas en los capítulos anteriores mediante balances de masa para cada una de las biorefinerías tanto para BCA y PCA en operación en lote y continuo, para posteriormente integrar estos resultados en una sola biorefinería. En el octavo capítulo, se muestran las conclusiones del presente trabajo, también se incluyen un apéndice en el que se presentan las gráficas correspondientes a los problemas de diseño para la etapa de evaporación, esto para proporcionar al lector una mejor comprensión del presente trabajo.

2. Conceptualización de la biorefinería

En este capítulo se conocerá como se diseñaron las biorefinerías con base a los modelos matemáticos que se irán exponiendo a lo largo de los siguientes capítulos, primero se mostrarán biorefinerías con operación en lote para BCA y PCA, seguidas de las biorefinerías con operación en continuo, para finalizar con las biorefinerías que integran la fermentación para BCA y PCA.

La aplicación de dichos modelos matemáticos se realizará mediante una plataforma de simulación en MATLAB, empleando una estrategia de optimización elaborada en Peñaloza (2014), tesis de maestría que antecede el presente trabajo donde se trabajó con un modelo matemático para describir la etapa de fermentación, esta estrategia surgió de la compilación de diversas simulaciones y análisis, y fue nombrada como “Brutish Scanning”, la cual emplea simulaciones en estado estacionario, y su objetivo principal es obtener una visualización completa del comportamiento de un proceso determinado haciendo uso de un modelo matemático, cuyas funciones de cambio son igualadas a cero para que puedan ser estudiadas como ecuaciones algebraicas.

Con este conjunto de ecuaciones, se pueden calcular los valores de las variables de estado, bajo diferentes condiciones de operación dadas por los valores de las variables de entrada. Permitiendo así, obtener una visualización completa del proceso mediante la elaboración de superficies de respuesta con los datos obtenidos de las simulaciones, permitiendo no solo obtener el óptimo si es que este existe, sino que también es posible obtener otros valores de las variables de entrada que, aunque no sean iguales a los que corresponden al óptimo, no difieren de forma significativa con los valores deseados de las variables de salida. Esta estrategia fue empleada en este trabajo para los modelos de hidrólisis enzimática y de fermentación.

2.1 Biorefinería en lote

En la Figura 2.1 se muestra el diseño de la biorefinería diseñada en este trabajo, se tienen dos biomásas que son el BCA y PCA que son alimentadas por separado, es decir se tienen dos biorefinerías, aunque el diseño es el mismo para ambas, la diferencia radica únicamente en el tipo de pretratamiento al cual fueron sometidas, es por ello que para el caso del PCA, este se indica con un recuadro punteado.

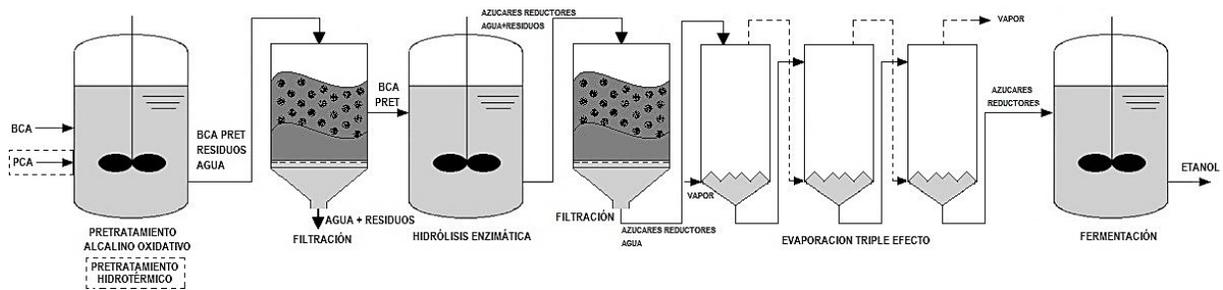


Figura 2.1 Diagrama de proceso de operación en lote para la producción de bioetanol lignocelulósico a partir de BCA y PCA.

Para el caso del BCA se puede observar que es alimentado a un reactor en lote para llevar a cabo un pretratamiento alcalino oxidativo, con la finalidad de que la celulosa este mas disponible para la sacarificación, para el PCA se realiza un pretratamiento hidrotérmico en un reactor en lote.

Una vez que se realizó el pretratamiento, se procede a realizar una filtración para separar el BCA y PCA pretratado del caldo que se formó, compuesto principalmente por residuos de las biomásas y agua, las biomásas pretratadas son llevadas a otro reactor en lote para efectuar la etapa de sacarificación por medio de hidrólisis enzimática.

Después de la hidrólisis enzimática, se supone que los azúcares reductores obtenidos, están disueltos completamente en el caldo del hidrolizado, para realizar una segunda filtración para separar todos los sólidos insolubles no convertidos.

Puesto que se tiene un caldo de azúcares reductores con una alta concentración de agua, es necesario realizar concentrar dichos azúcares, por lo que se procede a llevar a cabo una evaporación de triple efecto, logrando obtener una corriente con la concentración de glucosa óptima para llevar a cabo la fermentación.

Conceptualización de la biorefinería

Como última etapa, se tiene la fermentación llevada a cabo en un reactor en lote, para este trabajo se toma esta etapa como la final, debido a que el presente se centra en las etapas de conversión ya que existen muchos trabajos enfocados en la etapa de separación bioetanol-agua. La biorefinería propuesta fue diseñada estudiando cada una de las etapas anteriormente mencionadas de forma individual, para posteriormente ser integradas y analizar los rendimientos en términos de fracción etanol/agua.

2.2 Biorefinerías en continuo

Las biorefinerías de operación en continuo para la producción de etanol lignocelulósico a partir de BCA y PCA, difieren de las biorefinerías en lote respectivamente, para las etapas de sacarificación por hidrólisis enzimática y fermentación, las cuales se llevan a cabo en trenes de reactores de tanque agitado en operación continua, tal y como se muestran en las Figura 2.2.

2.3 Biorefinería con fermentación integrada para la producción de bioetanol de segunda generación

La biorefinería con fermentación integrada para la producción de etanol lignocelulósico a partir de BCA y PCA, manejan por separado las etapas de pretratamiento, filtración, sacarificación y evaporación para el BCA y PCA, integrando las corrientes líquidas provenientes de la evaporación en una sola, para alimentarlas a la etapa de fermentación, tanto en operación en lote como en continuo, como se observan en la Figura 2.3.

Conceptualización de la biorefinería

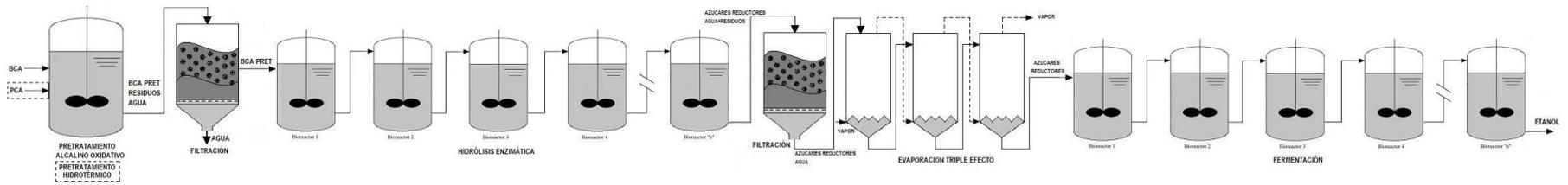


Figura 2.2 Diagrama de proceso de operación en continuo para la producción de bioetanol lignocelulósico a partir de BCA y PCA.

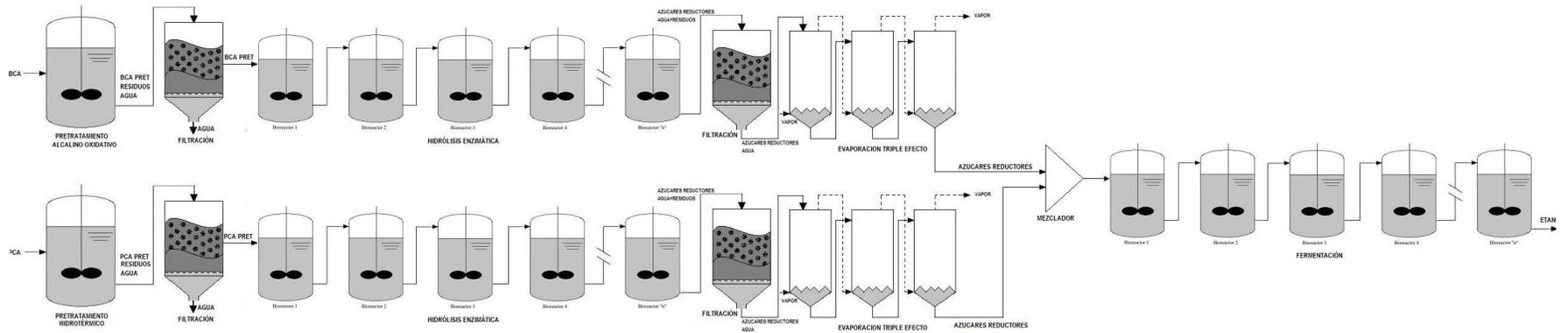


Figura 2.3 Diagrama de proceso de operación en continuo para la producción de bioetanol lignocelulósico en una biorefinería integrada a partir de BCA y PCA.

3. Pretratamiento

Como ya se ha hecho mención en capítulos anteriores, uno de los propósitos de este trabajo es determinar las mejores condiciones de operación para las biorefinerías propuestas a partir de BCA y PCA, empleando modelos matemáticos, sin embargo, en la literatura consultada no se encontraron modelos matemáticos que tomen en cuenta la cinética para la descripción de la etapa de pretratamiento.

Para las biorefinerías propuestas, se trabajó con los pretratamientos descritos en las secciones 3.1 y 3.2, tomando como base las condiciones de operación y concentraciones obtenidas en cada uno de ellos para las siguientes etapas de procesamiento.

3.1 Descripción del proceso de pretratamiento alcalino oxidativo de bagazo de caña de azúcar (BCA).

Este pretratamiento combinado puede obtener altos rendimientos de glucosa con condiciones de temperatura y presión moderadas y sin el uso de ácidos, lo cual disminuye la formación de inhibidores (Rabelo y col. 2014).

Algunos trabajos han demostrado el peróxido de hidrógeno es un agente efectivo para disolver la lignina y mejorar la conversión de residuos agrícolas en procesos de hidrólisis enzimática.

En 1957 se observó que para valores de pH menores a 10.5, menos de un 10% de H_2O_2 estaba presente como ion hidroperóxido y arriba de este valor. Pero también se observó que conforme este valor de pH aumentaba, el H_2O_2 se descomponía paralelamente. Es por ello que se fijó un intervalo de pH de entre 10 y 11.5 para asegurar la efectividad y estabilidad del H_2O_2 , con elevada presencia del ion hidroperóxido. Otro factor trascendente en la descomposición del H_2O_2 es la temperatura de reacción, ya que una elevación en la temperatura implica una mayor velocidad de reacción, pero también mayor facilidad de descomposición. Por este motivo la temperatura de reacción no se suele ser por arriba de 70°C - 80°C (Macorra y col. 2004).

Pretratamiento

En Meléndez (2017) se llevó a cabo un pretratamiento alcalino oxidativo para bagazo de caña de azúcar, que se obtuvo de los tamices de malla 20-40 (0.850-0.425mm). A estas muestras se les realizaron dos tipos de pretratamiento alcalino-oxidativo: con NaOH y Ca(OH)₂ como álcalis y peróxido de hidrógeno (H₂O₂) como oxidante, resultando el mejor el realizado con NaOH, ya que con este se obtiene la mayor concentración de celulosa y la menor concentración de lignina.

Para efectuar este pretratamiento, se adicionaron 925 ml de H₂O y 60 g de BCA en un vaso de precipitado de 2L, mezclándose hasta homogenizar y alcanzar una temperatura de aproximadamente 50° C. posteriormente se adicionaron 35ml de NaOH al 50 % y 40 ml de H₂O₂ al 50%. Esta adición se realiza alternando 10 mL de NaOH y 10 mL de H₂O₂ hasta que se completen los volúmenes antes descritos. Es necesario ajustar el pH a 11.5 con NaOH y HCl y la temperatura de 60° C durante 5h (Méendez y Vázquez, 2013).

Para lo cual se realizó el balance de masa para el BCA al usar dicho pretratamiento, como se muestra en la Tabla 2.1:

Tabla 3.1 Balance de masa de BCA.

Componente	BCA Natural (g)	BCA Pretratado (g)
Celulosa	32.51	29.02
Hemicelulosa	16.77	4.48
Lignina	6.16	1.20
Extractivos	4.57	2.22
TOTAL	60.00	36.92

Cabe señalar que se tiene una pérdida de sólidos de 23.08 g de sólidos que quedan disueltos en el caldo del pretratamiento.

Por lo tanto, al inicio del experimento la concentración de BCA era de 61.9290 g/L, y con una concentración de BCA pretratado de 38.7822 g/L y un porcentaje de rendimiento de 57.8333%.

Realizando las operaciones correspondientes es posible obtener la composición del BCA antes y después de haber sido sometido al pretratamiento, tal y como se puede observar en la Tabla 3.2., destacando que la composición de celulosa aumenta alrededor de un 30% y que la composición de lignina disminuye casi un 70%, lo cual podrá favorecer la hidrólisis enzimática que se llevará a cabo posteriormente.

Para facilitar los cálculos en las posteriores etapas de procesamiento, se supondrán los extractivos como parte de la lignina en el BCA y PCA pretratados.

Pretratamiento

Tabla 3.2 Composición del BCA en términos de fracción.

Componente	BCA Natural	BCA Pretratado
Celulosa	0.54	0.79
Hemicelulosa	0.28	0.12
Lignina	0.10	0.03
Extractivos	0.08	0.06

3.2 Descripción del proceso de pretratamiento alcalino oxidativo de bagazo de caña de azúcar (PCA)

En Alencar (2016) se llevó a cabo un pretratamiento hidrotérmico para PCA, en el que se mezclaron aproximadamente 200 g de material de masa seca con agua destilada 1:10 (p/v) a 195° C durante 10 minutos y se agitó constantemente a 200 rpm.

Del cual se obtuvo la siguiente caracterización química de PCA antes y después del pretratamiento, como se muestra en la Tabla 3.3:

Tabla 3.3 Composición del PCA en términos de fracción.

Componente	PCA Natural	PCA Pretratada
Celulosa	0.33	0.66
Hemicelulosa	0.26	0.08
Lignina	0.18	0.20
Extractivos	0.15	0.06
Cenizas	0.06	-

Cabe señalar que se tiene una pérdida de sólidos de 48.3762% que quedan disueltos en el caldo del pretratamiento. Por lo que al inicio del pretratamiento se tiene una concentración de 100 g/L de PCA natural y al finalizar se tiene una concentración de 53.5988 g/L de PCA pretratada, teniendo un porcentaje de rendimiento de 51.6237%.

Después del pretratamiento hidrotérmico, el contenido de celulosa aumento casi un 50%, mientras que el contenido de hemicelulosa disminuyo casi un 70%, mientras que el contenido de lignina aumento casi un 10%, reduciendo el contenido de extractivos alrededor de un 64% y desapareciendo el contenido de cenizas ya que están quedando disueltas en el caldo junto con los residuos de los otros componentes lignocelulósicos.

Pretratamiento

Después de llevar a cabo el pretratamiento alcalino oxidativo para el BCA y el pretratamiento hidrotérmico para PCA, se llevará a cabo una filtración en donde se supone que se separaran completamente los sólidos de los caldos de pretratamiento, para pasar posteriormente a la etapa de sacarificación por hidrólisis enzimática.

3.3 Conclusiones

De las biomásas empleadas, se puede observar que el BCA natural tiene un mayor contenido de celulosa en comparación con el PCA, por lo que, al haberse realizado el pretratamiento correspondiente a cada biomasa, se obtiene también un mayor contenido de celulosa en el BCA.

En cuanto a los pretratamientos empleados, se puede observar que con el pretratamiento alcalino oxidativo se obtiene un mayor porcentaje de rendimiento con respecto al pretratamiento hidrotérmico.

Por lo tanto, valdría mucho la pena que, para posteriores trabajos, se emplee el pretratamiento alcalino oxidativo en PCA para compararlo con el pretratamiento hidrotérmico y determinar con cual se obtiene un mayor contenido de celulosa y bajo contenido de lignina.

4. Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Después del pretratamiento, una etapa de suma importancia es la producción de azúcares reductores, ya que a través de estos se produce bioetanol, en las biorefinerías propuestas en el presente trabajo se emplea hidrólisis enzimática, debido a su alto rendimiento de azúcares, esto por la especificidad de las enzimas, la formación mínima de productos, los bajos requerimientos de energía, las condiciones de funcionamiento moderadas (pH 4–5 y T = 45–50° C) y la baja corrosividad.

Sin embargo, el alto costo de las enzimas, la baja velocidad de reacción y la dificultad de operar a altas concentraciones de sólidos (> 12%) son las principales barreras para la comercialización de etanol lignocelulósico a través de la ruta bioquímica.

Relacionado con las características de la enzima (adsorción, inhibición, sinergia, actividad) y las características del sustrato (grado de polimerización, cristalinidad, área de superficie accesible, contenido de lignina) afectan la hidrólisis de la celulosa, por lo tanto, es necesario emplear un modelo cinético que describa la acción sinérgica de las enzimas sobre sustratos lignocelulósicos.

Por lo anteriormente mencionado, existen nichos de investigación para conocer y comprender las condiciones de operación adecuadas para llevar a cabo la hidrólisis enzimática, típicamente este proceso se realiza en operación en lote, por lo que en este capítulo se estudia dicho proceso no solo en lote, sino también en continuo.

En este capítulo se describe en una primera sección el modelo matemático seleccionado para describir el comportamiento del proceso, en una segunda sección se realizó una simulación del proceso bajo diferentes combinaciones de configuraciones de operación para operaciones en lote y continuo, lo cual permitió obtener una visualización completa del comportamiento del proceso.

4.1 Marco de trabajo

4.1.1 Descripción del proceso de hidrólisis enzimática

La hidrólisis de celulosa se efectúa mediante una acción sinérgica de endo- β -1,4-glucanasa (EG), exo- β -1,4-celobiohidrolasa (CBH), exo- β -1,4-glucano glucohidrolasa y β -glucosidasa. Las primeras tres enzimas producen celobiosa y glucosa, la celobiosa se hidroliza a glucosa por la acción de β -glucosidasa; ambos azúcares causan inhibición del producto final, sin embargo, la celobiosa es un inhibidor mucho más fuerte que la glucosa (Kadam y col. 2004). La hemicelulosa se hidroliza por la acción de exo- β -1,4-xilanasas produciendo xilosa (Angarita y col. 2015).

Las condiciones óptimas de las enzimas normalmente son en temperaturas de 40 °C a 50 °C y con un pH de entre 4 y 5. En consecuencia, la hidrólisis enzimática tiene distintos beneficios como baja toxicidad, bajo costo en los servicios y poca corrosión comparada con la hidrólisis ácida o alcalina, además de que no se forman inhibidores como subproductos (Gupta y Verma, 2015).

4.1.2 Modelo matemático de hidrólisis enzimática

4.1.2.1 Antecedentes del modelo matemático.

El modelo de Kadam y col. (2004) es uno de los más empleados para describir la hidrólisis enzimática de celulosa y ha sido elegido para modelar la hidrólisis enzimática de BCA. Este modelo ha sido verificado experimentalmente por Hodge y col. (2009) y Zheng y col. (2009), también ha sido evaluado en aplicaciones de simulación y optimización de procesos (Hodge y col. 2009 y Morales-Rodríguez y col. 2011) y recientemente usado para modelar la hidrólisis enzimática de BCA como en Câmara (2015). El modelo propuesto está basado en la bioquímica de la hidrólisis enzimática e incluye adsorción de enzima, inhibición por producto, reactividad de sustrato y conversión de hemicelulosa a xilosa de acuerdo con Câmara (2015), sin embargo, descuida la inactivación enzimática térmica y mecánica.

4.1.2.2 Adsorción de enzimas

La adsorción de enzimas en la superficie del sustrato para formar un complejo enzima-sustrato que libera un producto es el paso clave en la catálisis enzimática. Muchos de los primeros modelos cinéticos de hidrólisis enzimática se basaron en la cinética clásica de

Michaelis-Menten, sin embargo, solo es válida cuando el sustrato está en exceso en relación con la enzima. Aunque las isothermas de tipo Langmuir se han utilizado para describir la adsorción enzimática, los supuestos del modelo de Langmuir como sitios de unión uniformes y sin interacción entre las moléculas absorbentes, no son válidos para la adsorción de celulosa sobre la celulosa; sin embargo, la forma hiperbólica de la isoterma de tipo Langmuir es útil para la representación matemática de los datos de adsorción de enzimas, por lo que se ha elegido en el modelo matemático empleado en este trabajo para modelar el comportamiento de adsorción de la enzima.

4.1.2.3 Inhibición por producto

La inhibición de las enzimas por su producto de hidrólisis (glucosa y celobiosa) se conoce desde hace tiempo. La inhibición del modo competitivo supone que el azúcar inhibidor es un análogo del sustrato y se une competitivamente al sitio activo, lo que retarda la formación del complejo enzima-sustrato. Se ha sugerido que la inhibición competitiva es dominante y más realista, por lo tanto, se ha adoptado el patrón de inhibición competitiva para representar todas las inhibiciones del producto (glucosa, celobiosa y xilosa) en la enzima.

4.1.2.4 Reactividad de sustrato

La reactividad del sustrato (R_s) representa las variaciones en las características estructurales del sustrato (es decir, cristalinidad, grado de polimerización, área superficial, accesibilidad del sustrato) durante la hidrólisis. La celulosa está formada por regiones cristalinas y amorfas y algunos investigadores han descubierto que la celulosa amorfa se degrada 3-30 veces más rápido con respecto a la celulosa altamente cristalina por la celulosa fúngica y las bacterias ruminales, esto sugiere que R_s es un factor importante que afecta la hidrólisis enzimática de la celulosa. Sin embargo, según lo indicado por Zheng y col. (2009) otros investigadores no encontraron cambios sustanciales con el progreso de la hidrólisis u obtuvieron resultados equívocos. Dado que no es fácil obtener medidas independientes de los equilibrios de adsorción enzimática para la celulosa cristalina y amorfa, no se realizó una distinción para el desarrollo del modelo cinético efectivo. Por lo tanto, todas las transformaciones del sustrato se agruparon en un parámetro R_s correlacionado con la concentración de sustrato normalizado (S/S_0) de acuerdo con la Ec. (4.4), donde la constante adimensional de proporcionalidad (α) se determinó experimentalmente como cercana a la unidad para otros sustratos lignocelulósicos, y también se supuso como unidad en este trabajo.

4.1.2.5 Enzimas

Se utilizó el complejo enzimático comercial Cellic CTec2 (Novozymes, Araucária, Paraná, Brasil) con una actividad de 203 FPU/ml (36 mg de proteína / ml) en los ensayos de hidrólisis, el cual está compuesto por celulasas, β -glucosidasas y hemicelulasa, el cual tiene un costo de \$2582.00 por cada 50 mL (Sigma Aldrich, 2020).

4.1.3 Descripción del modelo matemático

Un modelo de Kadam modificado ha sido elegido para escribir la hidrólisis enzimática de paja de caña de azúcar, como se muestra en la Figura 4.1, un esquema simplificado de cuatro reacciones es la base para la modelación de la hidrólisis de celulosa. Cada reacción esta potencialmente inhibida por los azúcares del producto (glucosa, celobiosa y xilosa). La inhibición por xilosa se incluyó en el modelo basado en compuestos detectados en el hidrolizado enzimático. Durante la hidrólisis, el complejo enzimático se absorbe primero en los componentes de la superficie del sustrato (celulosa, hemicelulosa y lignina); esta adsorción fue expresada por una isoterma de tipo Langmuir. Las principales suposiciones para la derivación de las ecuaciones del modelo incluyen:

- i. El complejo enzimático se modeló como una pseudo-enzima con varias actividades enzimáticas (es decir, se usó una sola variable para describir la actividad de la enzima).
- ii. La actividad enzimática total se consideró proporcional a la concentración de proteína en la fase acuosa, por lo tanto, el complejo enzimático libre se midió como la concentración de proteína en el sobrenadante.
- iii. La isoterma de tipo Langmuir describe la adsorción del complejo enzimático en las velocidades de reacción (r_1 , r_2 y r_4) que se producen en la superficie del sustrato.
- iv. No hay distinción entre celulosa cristalina y amorfa, por lo que la celulosa se consideró uniformemente susceptible al ataque enzimático.
- v. Se supone que la composición de la superficie del sustrato para la adsorción enzimática es aproximadamente igual a la composición de fibra completa, luego se utilizó la composición de la fibra completa para calcular el complejo enzimático adsorbido en los componentes de la superficie.
- vi. La inactivación de enzimas mecánicas y térmicas no es significativa.
- vii. La conversión de la celobiosa a la glucosa ocurre por catálisis homogénea siguiendo la cinética Michaelis-Menten clásica.

De acuerdo con estos supuestos, Angarita y col. (2015) propuso el siguiente modelo matemático. La cantidad de complejo enzimático absorbido en el sustrato y sus componentes son calculados en las Ec. (4.1-4.3). La reactividad de sustrato esta descrita por la Ec. (4.4) con

α supuesta como 1, basado en previos trabajos de modelación de hidrólisis de bagazo de caña. Las velocidades de reacción de la Figura 4.1 fueron calculadas usando las Ec. (4.5-4.8). El balance de masa para el complejo enzimático, componentes de sustrato y azúcares producidos están expresados en las Ec. (4.9-4.15).

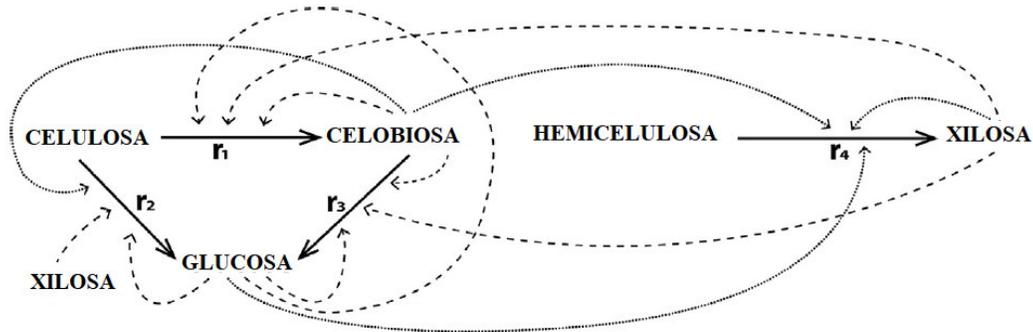


Figura 4.1 Esquema para la reacción de hidrólisis de celulosa. Enzimas implicadas en r_1 : endo- β -1,4-glucanasa y exo- β -1,4-celobiohidrolasa. Enzimas implicadas en r_2 : exo- β -1,4-celobiohidrolasa (CBH) y exo- β -1,4-glucano glucosidolasa. Enzimas implicadas en r_3 : β -glucosidasa. Enzimas implicadas en r_4 : exo- β -1,4-xilanasa. Las líneas punteadas y sobre punteadas muestran la inhibición de azúcares en las enzimas. Tanto r_4 como la línea de puntos se adoptaron de Câmara (2012). Modificado de Soccol y col. (2010).

Isoterma tipo Langmuir

$$E_{BS} = \frac{E_B}{S} = \frac{E_{max}K_{ad}E_F}{1 + K_{ad}E_F} \quad (4.1)$$

Complejo enzimático absorbido sobre celulosa

$$E_{BC} = E_B \frac{C}{S} \quad (4.2)$$

Complejo enzimático adsorbido sobre hemicelulosa

$$E_{BH} = E_B \frac{H}{S} \quad (4.3)$$

Reactividad de sustrato

$$R_S = \alpha \frac{S}{S_0} \quad (4.4)$$

Velocidad de reacción celulosa a celobiososa

$$r_1 = \frac{k_{1r}E_{BC}R_S S}{1 + \frac{G_2}{K_{1IG_2}} + \frac{G}{K_{1IG}} + \frac{X}{K_{1IX}}} \quad (4.5)$$

Velocidad de reacción celulosa a glucosa

$$r_2 = \frac{k_{2r}E_{BC}R_S S}{1 + \frac{G_2}{K_{2IG_2}} + \frac{G}{K_{2IG}} + \frac{X}{K_{2IX}}} \quad (4.6)$$

Velocidad de reacción celobiosa a glucosa

$$r_3 = \frac{k_{3r}E_F G_2}{\left(1 + \frac{G}{K_{3IG}} + \frac{X}{K_{3IX}}\right) K_{3M} + G_2} \quad (4.7)$$

Velocidad de reacción hemicelulosa a xilosa

$$r_4 = \frac{k_{4r}E_{BH}R_S S}{1 + \frac{G_2}{K_{4IG_2}} + \frac{G}{K_{4IG}} + \frac{X}{K_{4IX}}} \quad (4.8)$$

Balance de complejo enzimático total

$$E_T = E_F + E_B \quad (4.9)$$

Balance de sólidos totales

$$\begin{aligned} S &= C + H + L \\ \frac{dS}{dt} &= \frac{dC}{dt} + \frac{dH}{dt} \\ \frac{dS}{dt} &= -r_1 - r_2 - r_4 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Balance de celulosa

$$\frac{dC}{dt} = -r_1 - r_2 \quad (4.11)$$

Balance de Hemicelulosa

$$\frac{dH}{dt} = -r_4 \quad (4.12)$$

Balance de glucosa

$$\frac{dG}{dt} = 1.111r_1 + 1.053r_3 \quad (4.13)$$

Balance de Celobiosa

$$\frac{dG_2}{dt} = 1.056r_1 - r_3 \quad (4.14)$$

Balance de Xilosa

$$\frac{dX}{dt} = 1.136r_4 \quad (4.15)$$

donde:

E_B = concentración de complejo enzimático ligado a sólidos (g/L).

E_{BC} = concentración de complejo enzimático ligado a celulosa (g/L).

E_{BH} = concentración de complejo enzimático ligado a hemicelulosa (g/L).

E_F = concentración de complejo enzimático libre (g/L).

E_{max} = masa máxima de complejo enzimático que puede ser absorbido en una unidad de masa de sustrato (g de proteína/kg de sustrato).

E_T = concentración total de complejo enzimático (g/L).

G = concentración de glucosa (g/L).

G_2 = concentración de celobiosa (g/L).

H = concentración de hemicelulosa (g/L).

K_{3M} = constante de saturación de sustrato (celobiosa) (g/L).

K_{ad} = constante de disociación para la adsorción de enzima/reacción de desorción (L/g proteína).

K_{iG} = constantes de inhibición para glucosa (g/L); $i = 1, 2, 3$ y 4 .

K_{iG_2} = constantes de inhibición para celobiosa (g/L); $i = 1, 2, 3$ y 4 .

K_{iX} = constantes de inhibición para xilosa (g/L); $i = 1, 2, 3$ y 4 .

k_{ir} = constantes de velocidad de reacción (L/g·h); $i = 1, 2$ y 4 . k_{3r} (1/h).

L = concentración de lignina (g/L).

r_i = velocidad de reacción (g/L·h); $i = 1, 2, 3$ y 4 .

R_S = parametro de reactividad de sustrato (unidades adimensionales).

S = concentración de sólidos (g/L).

S_0 = concentración inicial de sólidos (g/L).

X = concentración de xilosa (g/L).

α = constante relacionando la reactividad del sustrato con el grado de hidrólisis (unidades adimensionales).

El modelo original se simplificó suponiendo la modificación de las actividades enzimáticas de celulasa y hemicelulasa como una pseudoenzima capaz de producir glucosa, celobiosa y xilosa a partir del sustrato. Sin embargo, en este trabajo se decidió trabajar con el modelo original debido a que con este se obtuvieron las mejores reproducciones de los resultados reportados en el trabajo de Angarita y col. (2015) para un reactor en operación en lote como el que se muestra en la siguiente figura:

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

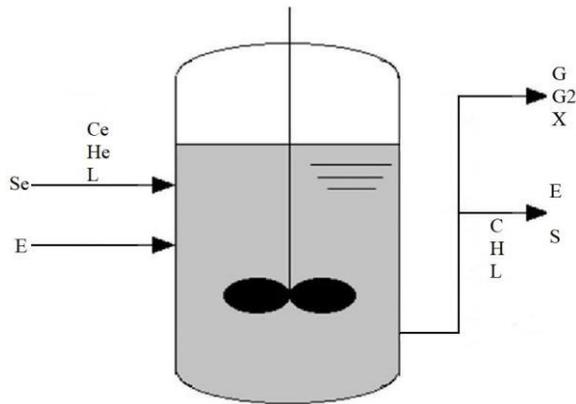


Figura 4.2 Bioreactor en lote.

4.1.3.1 Operación en continuo

En el presente trabajo se realizó la simulación de un tren de reactores de tanque agitado en operación continua, para representar la etapa de sacarificación en una biorrefinería de segunda generación mediante hidrólisis enzimática, tomando como base el esquema representado en la Figura 4.3.

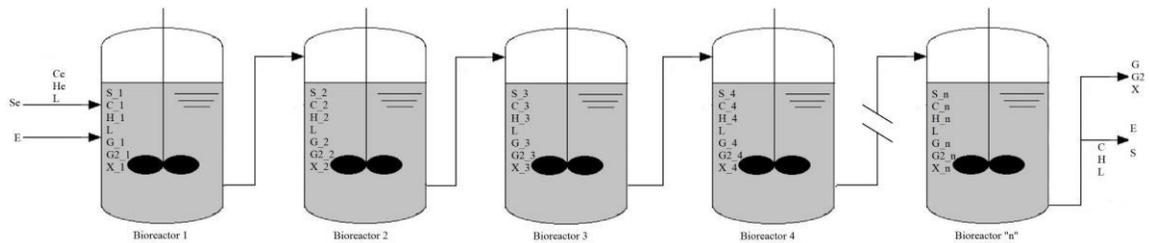


Figura 4.3. Tren de CSTR para hidrólisis enzimática.

Por lo tanto, las Ec. 4.10-4.15 toman la siguiente forma para una operación en continuo:

Balance de sólidos totales

$$\frac{dS_j}{dt} = -r_1 - r_2 - r_4 + D(S_{j-1} - S_j) \quad S_j(t_0) = S_0^j \quad S_0 = S_e \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (4.16)$$

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Balance de celulosa

$$\frac{dC_j}{dt} = -r_1 - r_2 + D(C_{j-1} - C_j) \quad C_j(t_0) = C_0^j \quad C_0 = C_e \quad (4.17)$$

Balance de Hemicelulosa

$$\frac{dH}{dt} = -r_4 + D(H_{j-1} - H_j) \quad H_j(t_0) = H_0^j \quad H_0 = H_e \quad (4.18)$$

Balance de glucosa

$$\frac{dG}{dt} = 1.111r_1 + 1.053r_3 + D(G_{j-1} - G_j) \quad (4.19)$$

Balance de Celobiosa

$$\frac{dG_2}{dt} = 1.056r_1 - r_3 + D(G_{2j-1} - G_{2j}) \quad (4.20)$$

Balance de Xilosa

$$\frac{dX}{dt} = 1.136r_4 + D(X_{j-1} - X_j) \quad (4.21)$$

En la Ec. 4.16 se presenta el balance de masa de sustrato, donde “j” es el número de reactor y “n” es el número de reactores que conforman el tren, D es la velocidad de dilución (Flujo/Volumen, F/V). S_{j-1} , C_{j-1} , H_{j-1} , G_{j-1} , G_{2j-1} y X_{j-1} son las concentraciones de sustrato, celulosa, hemicelulosa, glucosa, celobiosa y xilosa en la corriente de entrada para el reactor j , S_j , C_j , H_j , G_j , G_{2j} y X_j son las concentraciones de sustrato, celulosa, hemicelulosa, glucosa, celobiosa y xilosa en la corriente de salida del reactor j .

4.1.4 Marco de trabajo del problema de simulación

Se tomó como caso de estudio un tren de cinco reactores, por lo tanto, dicho sistema puede visualizarse como un sistema de tres entradas (S_e , D y E) y cuatro salidas (S_5 , G_5 , G_{25} y X_5), por lo que es necesario determinar los valores de las tres entradas para los cuales se obtenga una corriente de salida con una máxima concentración de glucosa.

4.1.4.1 Análisis de grados de libertad

Debido a que el proceso planteado involucra únicamente modelos algebraicos, es necesario saber si existe la información suficiente para resolver las incógnitas (S_e , D y E), por lo que se analizaron los grados de libertad del sistema, este consiste en determinar el número de variables correspondientes a las corrientes del sistema (entrada y salida) y a este valor restar el número de ecuaciones independientes del sistema (número de especies en el sistema) y las corrientes especificadas que solo debe ser una y las relaciones adicionales.

Sustituyendo los valores requeridos se obtiene el siguiente análisis:

Tabla 4.1. Análisis de grados de libertad.

Elementos	Adición	Sustracción
VARIABLES DE LAS CORRIENTES	7	
Ecuaciones independientes		6
Corrientes especificadas		
Composiciones		
Flujos		
TOTAL	7	-6

1

Dado que los grados de libertad son mayores que cero (Número de variables > Número de restricciones), el problema está sub especificado y no es posible resolverlo por la falta de información. Realizando el análisis de una forma más detallada se obtiene:

Tabla 4.2. Desglose de corrientes.

Corrientes	Entrada	Salida
Celulosa	?	?
Hemicelulosa	?	?
Celobiosa	?	?
Glucosa	?	?
Xilosa	?	?
Complejo enzimático	?	?
Velocidad de dilución	?	-

Hay un total de siete incógnitas, y se tienen seis ecuaciones de estado (4.9, 4.17, 4.18, 4.19, 4.20, 4.21), se obtiene:

$$GL = \text{No. Variables} - \text{No. Restricciones}$$

$$GL = 7 - 6 = 1$$

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Por lo que es necesario suponer variables y agregar restricciones, para ello se explorará la siguiente alternativa de solución: Dada cierta D , C_{j-1} , H_{j-1} , G_{j-1} , G_{2j-1} y X_{j-1} , se pueden obtener los valores de C_j , H_j , G_j , G_{2j} y X_j que se alcanzan y así visualizar el comportamiento de los reactores.

Tabla 4.3. Desglose de corrientes para solución a explorar.

Corrientes	Entrada	Salida
Celulosa	Supuesta	?
Hemicelulosa	Supuesta	?
Celobiosa	Supuesta	?
Glucosa	Supuesta	?
Xilosa	Supuesta	?
Complejo enzimático	Supuesta	?
Velocidad de dilución	Supuesta	-

Tabla 4.4. Análisis de grados de libertad para solución a explorar.

Elementos	Adición	Sustracción
Variables de las corrientes	7	
Ecuaciones independientes		6
Corrientes especificadas		1
Composiciones		
Flujos		
TOTAL	7	-7
	0	

4.1.5 Estrategia de estudio y simulación

Para resolver los problemas planteados se hace uso de la construcción de superficies de respuesta de las concentraciones de sustrato y azúcares reductores en los reactores con respecto al espacio de valores que pueden tomar las entradas del proceso (o condiciones de operación). La estimación de las concentraciones de celulosa, hemicelulosa, celobiosa, glucosa, xilosa y complejo enzimático que se obtienen a ciertas condiciones se calculara en base al modelo matemático. Con lo que se tendrá el siguiente ambiente de modelado.

Problema de simulación: determinar cuáles son los valores de las variables de entrada que proporcionan la mayor concentración de glucosa, permitiendo observar el comportamiento de los reactores, explorando todas las variables de entrada. Para ello se requieren la solución de las ecuaciones algebraicas, barriendo todos los valores posibles para las diferentes combinaciones, que se pueden derivar de los campos de acción en los cuales se pueden llevar a cabo el proceso de sacarificación.

4.2 Simulación

En esta sección se conocerá el comportamiento del proceso de sacarificación con base en el modelo matemático descrito en la sección 4.1.3.1. Primero se realizará una simulación del proceso bajo diferentes aspectos en combinación con los análisis de grados de libertad de la Tabla 4.4, en el que se supone la concentración de la alimentación de celulosa, hemicelulosa, celobiosa, glucosa, xilosa, complejo enzimático y velocidad de dilución.

La simulación consistió en la solución numérica de las ecuaciones algebraicas que resultan de igualar a cero las funciones de cambio del modelo de Angarita (ecuaciones 4.10-4.15) para lo cual se empleó una simulación digital en Matlab R2018b con una subrutina que utiliza el método de Newton, en la cual en una primera parte del programa se presenta la inicialización donde se establece el criterio de convergencia, el factor de relajación, y otros parámetros iniciales necesarios para el programa. El bucle principal de iteración viene a continuación, en esta parte, los componentes de la matriz jacobiana se calculan por diferenciación numérica, y nuevas estimaciones de las raíces se calculan. Este proceso continúa hasta que se cumple el criterio de convergencia o se alcance un límite máximo de iteraciones.

4.2.1 Establecimiento de los escenarios de cálculo para la simulación

Para llevar a cabo la simulación es necesario establecer primero los escenarios de cálculo en los cuales se trabajará, según lo reportado en Angarita y col. (2015), las concentraciones de complejo enzimático empleadas fueron 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU/g C, además en dicho trabajo se manejan cargas de biomasa de 10, 15 y 20% p/v, como caso adicional se manejará también una carga de 5% p/v de BCA y PCA. Por lo que el balance de masa para las variables de entrada *S*, *C*, *H* y *L* se muestran en las Tablas 4.5 y 4.6.

Tabla 4.5. Alimentaciones en términos de concentración para la HE de BCA.

% p/v	Sustrato (g/L)	Celulosa (g/L)	Hemicelulosa (g/L)	Lignina (g/L)
5	50	39.30	6.07	0.46
10	100	78.60	12.13	0.93
15	150	117.90	18.20	1.39
20	200	157.20	24.27	1.85

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Tabla 4.6. Alimentaciones en términos de concentración para la HE de PCA.

% p/v	Sustrato (g/L)	Celulosa (g/L)	Hemicelulosa (g/L)	Lignina (g/L)
5	50	33	4.15	12.6
10	100	66	8.3	25.2
15	150	99	12.45	37.8
20	200	132	16.6	50.4

Para los escenarios anteriores, es necesario realizar la conversión de FPU/g C a g/L para cada una de las cargas de complejo enzimático. En las Tablas 4.7 y 4.8 se muestran las concentraciones de complejo enzimático total en g/L, para cada una de las cargas de sólidos de BCA y PCA.

Tabla 4.7. Concentraciones totales de complejo enzimático para cargas de sólidos de BCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.

ET (FPU/g C)							
% p/v	5	10	20	30	40	50	60
5	0.0348	0.0697	0.1394	0.2091	0.2788	0.3485	0.4182
10	0.0697	0.1394	0.2788	0.4182	0.5576	0.6969	0.8363
15	0.1045	0.2091	0.4182	0.6273	0.8363	1.0454	1.2545
20	0.1394	0.2788	0.5576	0.8363	1.1151	1.3939	1.6727

Tabla 4.8. Concentraciones totales de complejo enzimático para cargas de sólidos de PCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.

ET (FPU/g C)							
% p/v	5	10	20	30	40	50	60
5	0.0146	0.0293	0.0585	0.0878	0.1170	0.1463	0.1756
10	0.0585	0.1170	0.2341	0.3511	0.4682	0.5852	0.7023
15	0.0878	0.1756	0.3511	0.5267	0.7023	0.8778	1.0534
20	0.1170	0.2341	0.4682	0.7023	0.9364	1.1704	1.4045

Una vez realizados estos cálculos, se procede a calcular la E_B y E_F para las concentraciones de complejo enzimático mencionadas. Para ello, la Ec. (4.1) se manejó en términos de E_B , resultando:

$$E_B = \frac{E_{max}K_{ad}E_F S}{1 + K_{ad}E_F} \quad (4.22)$$

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Realizando el balance de masa para el complejo enzimático libre se obtiene:

$$E_F = E_T - E_B \tag{4.23}$$

Sustituyendo la Ec. (4.23) en la (4.22) se obtiene:

$$E_B = \frac{E_{max}K_{ad}S(E_T - E_B)}{1 + K_{ad}(E_T - E_B)}$$

que, al ser despejada e igualada a cero, puede ser vista también como una ecuación algebraica de segundo orden:

$$-K_{ad}E_B^2 + (1 + K_{ad}E_T + E_{max}K_{ad}S)E_B - E_{max}K_{ad}SE_T = 0 \tag{4.24}$$

Obteniendo una nueva ecuación la cual puede ser resuelta por la formula general para las ecuaciones algebraicas de segundo orden, con la que es posible calcular EB y EF con las ET presentadas en las Tablas 4.7 y 4.8, las cuales se muestran en las Tablas 4.9 y 4.10 respectivamente.

Tabla 4.9. Concentraciones E_B y E_F para cargas de sólidos de BCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.

	% P/V							
	5		10		15		20	
ET (FPU/g C)	EB (g/L)	EF (g/L)						
5	0.0257	0.0092	0.0590	0.0107	0.0933	0.0113	0.1278	0.0116
10	0.0504	0.0193	0.1166	0.0228	0.1848	0.0243	0.2537	0.0251
20	0.0969	0.0424	0.2265	0.0523	0.3613	0.0569	0.4979	0.0596
30	0.1390	0.0701	0.3275	0.0907	0.5256	0.1016	0.7278	0.1086
40	0.1762	0.1026	0.4171	0.1404	0.6729	0.1634	0.9357	0.1794
50	0.2083	0.1401	0.4934	0.2035	0.7979	0.2476	1.1123	0.2816
60	0.2357	0.1825	0.5556	0.2807	0.8972	0.3573	1.2504	0.4223

Tabla 4.10. Concentraciones E_B y E_F para cargas de sólidos de PCA de 5, 10, 15 y 20% p/v en unidades de g/L.

	% P/V							
	5		10		15		20	
ET (FPU/g C)	EB (g/L)	EF (g/L)						
5	0.0216	0.0077	0.0432	0.0153	0.0648	0.0230	0.0864	0.0306
10	0.0426	0.0159	0.0852	0.0319	0.1278	0.0478	0.1704	0.0637
20	0.0825	0.0345	0.1650	0.0691	0.2475	0.1036	0.3300	0.1382

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

30	0.1194	0.0562	0.2387	0.1124	0.3581	0.1686	0.4775	0.2248
40	0.1529	0.0812	0.3058	0.1624	0.4587	0.2435	0.6116	0.3247
50	0.1830	0.1097	0.3659	0.2193	0.5489	0.3290	0.7318	0.4386
60	0.2095	0.1417	0.4189	0.2833	0.6284	0.4250	0.8379	0.5666

En la Figura 4.4, se visualiza cada uno de los trenes de reactores como una caja negra, teniendo siete velocidades de dilución, cuatro cargas de biomasa y siete cargas de complejo enzimático, realizándose así 196 simulaciones para cada una de las biomásas (BCA y PCA), en las cuales se obtuvieron las concentraciones de glucosa, celobiosa, xilosa en la corriente de salida de cada reactor, así como las concentraciones de celulosa y hemicelulosa en la corriente de salida de cada reactor, las cuales no fueron consumidas durante el proceso de sacarificación, cabe mencionar que el modelo toma como constante el valor de la lignina, por lo que junto con la celulosa y hemicelulosa componen el sustrato total no consumido, también se calcularon las velocidades de reacción r_1 , r_2 , r_3 y r_4 , para cada uno de los reactores.

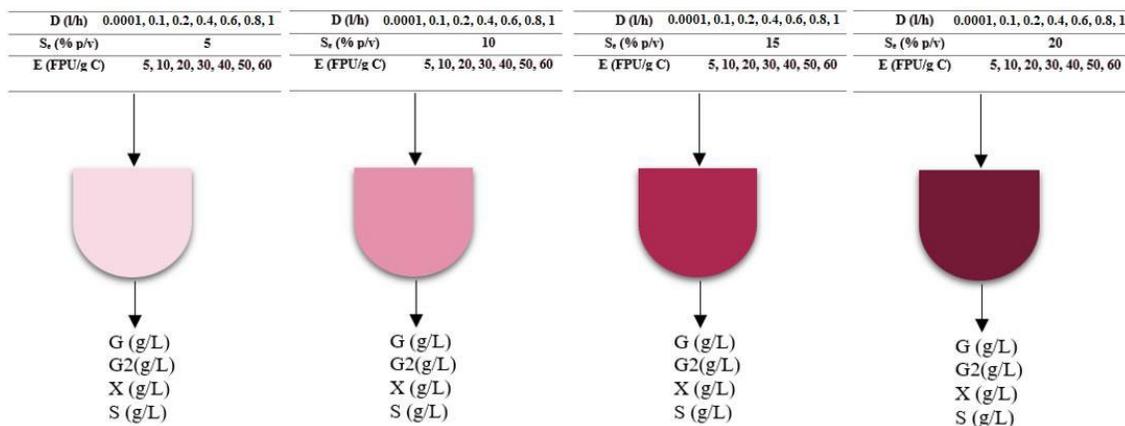


Figura 4.4 Escenarios de simulación para BCA y PCA.

4.2.2 Simulación de HE

Siguiendo los escenarios de cálculo mostrados en la Figura 4.4, se tomaron en cuenta siete velocidades de dilución, siete cargas de complejo enzimático y cuatro cargas de BCA, dando un total de 196 combinaciones, estas serán aplicadas para el escenario en el que se tiene un reactor y tren de dos, tres, cuatro y cinco reactores, por lo tanto, se tiene un total de 980 escenarios de cálculo para el BCA y PCA pretratados.

4.2.1.1 Valores de las variables de entrada

De la Figura 4.4, donde se expone que se trabajara con cuatro cargas de BCA y PCA pretratados, se realizaron los cálculos correspondientes para efectuar las cargas de sustrato en términos de concentración g/L para 5, 10, 15 y 20% p/v respectivamente.

Dado que los componentes involucrados son la celulosa y hemicelulosa, cuyas ecuaciones de balance de materia corresponden a 4.17 y 4.18 respectivamente, en la Tabla 4.11 y 4.12 se muestran los resultados obtenidos para cada una de las cargas de BCA y PCA, así como la concentración de agua requerida.

Tabla 4.11 Valores de las variables de entrada respecto a la composición de BCA para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v.

% p/v	S_e (g/L)	C_e (g/L)	H_e (g/L)	Agua (g/L)
50	50.0000	39.3000	6.0650	962.5691
100	100.0000	78.6000	12.1300	925.1363
150	150.0000	117.9000	18.1950	887.7043
200	200.0000	157.2000	24.2600	850.2725

Tabla 4.12 Valores de las variables de entrada respecto a la composición de PCA para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v.

% p/v	S_e (g/L)	C_e (g/L)	H_e (g/L)	Agua (g/L)
50	50.0000	33.0000	4.1500	963.4291
100	100.0000	66.0000	8.3000	926.8691
150	150.0000	99.0000	12.4500	890.3044
200	200.0000	132.0000	16.6000	853.7376

De la información mostrada, se puede observar que conforme aumente la carga de BCA y PCA, se incrementa la concentración de celulosa y hemicelulosa la cual es proporcional al aumento, la diferencia en la concentración de agua para las biomasas se debe a la diferencia de densidades de estas, como la densidad del BCA es menor a la del PCA, el BCA ocupa un mayor volumen por lo que requiere una menor cantidad de agua en comparación que con el PCA, aunque esta diferencia es poco significativa.

4.2.2 Resultados obtenidos de la simulación

4.2.2.1 Concentración de agua en la corriente de salida

La concentración de agua en la corriente de salida es la misma que en la corriente de entrada, ya que el modelo matemático no plantea una ecuación de balance de materia para ella, por lo que en este trabajo se supondrá que es la misma al inicio y al final de la hidrólisis enzimática para el BCA y PCA, las cuales se encuentran reportadas en las Tablas 4.11 y 4.12.

4.2.2.2 Concentración de lignina en la corriente de salida

Al igual que la concentración de agua, la concentración de lignina también permanece constante a lo largo del proceso de sacarificación, tanto para el BCA y PCA, cuyos valores se encuentran en las Tablas 4.11 y 4.12.

Como las concentraciones de agua y lignina se consideran las mismas al inicio y al final del proceso, no se realizaron gráficas para reportarlas ya que únicamente se tendrían placas a las diferentes cargas de sólidos de 5, 10, 15 y 20% p/v.

A continuación, se mostrarán graficas de mallado en donde se podrá apreciar el comportamiento del proceso de hidrolisis enzimática para cada uno de los escenarios, dichas graficas reportan los valores de las variables de salida que intervienen en la sacarificación.

4.2.2.3 Concentración de sustrato en la corriente de salida

En las Figuras 4.5 y 4.6 se puede observar la concentración de sustrato en la corriente de salida para uno, dos, tres y cuatro reactores a velocidades de dilución que van de 0 a 1, la velocidad de dilución para un reactor en lote es de 0, por lo tanto, en todos los casos se debe tomar en cuenta que, a esta velocidad, se está teniendo únicamente un reactor en operación en lote, y que se estaría comparando contra un reactor en operación en continuo, dos reactores y así sucesivamente.

Se puede observar que hay cuatro superficies por gráfica, estas superficies corresponden a cargas de BCA y PCA pretratado a 5, 10, 15 y 20% p/v, la superficie inferior corresponde a la carga de 5% p/v, continuando con la siguientes, siendo que la superficie superior corresponde a la de 20% p/v.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

La menor concentración de sustrato se tiene cuando la velocidad de dilución es 0, al tener la operación en continuo con una velocidad de 0.1, la concentración de sustrato comienza a incrementarse considerablemente, conforme la velocidad de dilución se incrementa, la concentración de sustrato también lo hace, pero no de forma tan significativa.

Por lo tanto, la relación entre la concentración de sustrato y la velocidad de dilución es directamente proporcional, si la velocidad de dilución incrementa, la concentración de sustrato también aumenta.

Comparando esta relación al aumentar la cantidad de reactores, la diferencia entre el aumento de concentración de sustrato va disminuyendo paulatinamente con el aumento de reactores, por lo que, en el caso de la operación en continuo, es conveniente manejar un tren de reactores.

En cuanto a la relación entre la concentración de complejo enzimático y sustrato, se puede observar que el comportamiento es inversamente proporcional, ya que con el aumento de la carga de complejo enzimático se tiene una disminución de la concentración de sustrato en la corriente de salida, esta disminución es más significativa a partir de los 20 FPU, y conforme aumenta la cantidad de reactores, la disminución de la concentración de sustrato es más significativa, por lo que, en este caso, con un número mayor de reactores el complejo enzimático tiene una mayor actividad al disminuir la concentración de sustrato en la corriente de salida.

En cuanto a la diferencia de concentración de sustrato en el corriente de salida, la menor concentración corresponde al BCA, lo cual podía deducirse al observar las Tablas 4.11 y 4.12, ya que, al contar con un mayor contenido de celulosa, este puede ser hidrolizado para convertirse en glucosa.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

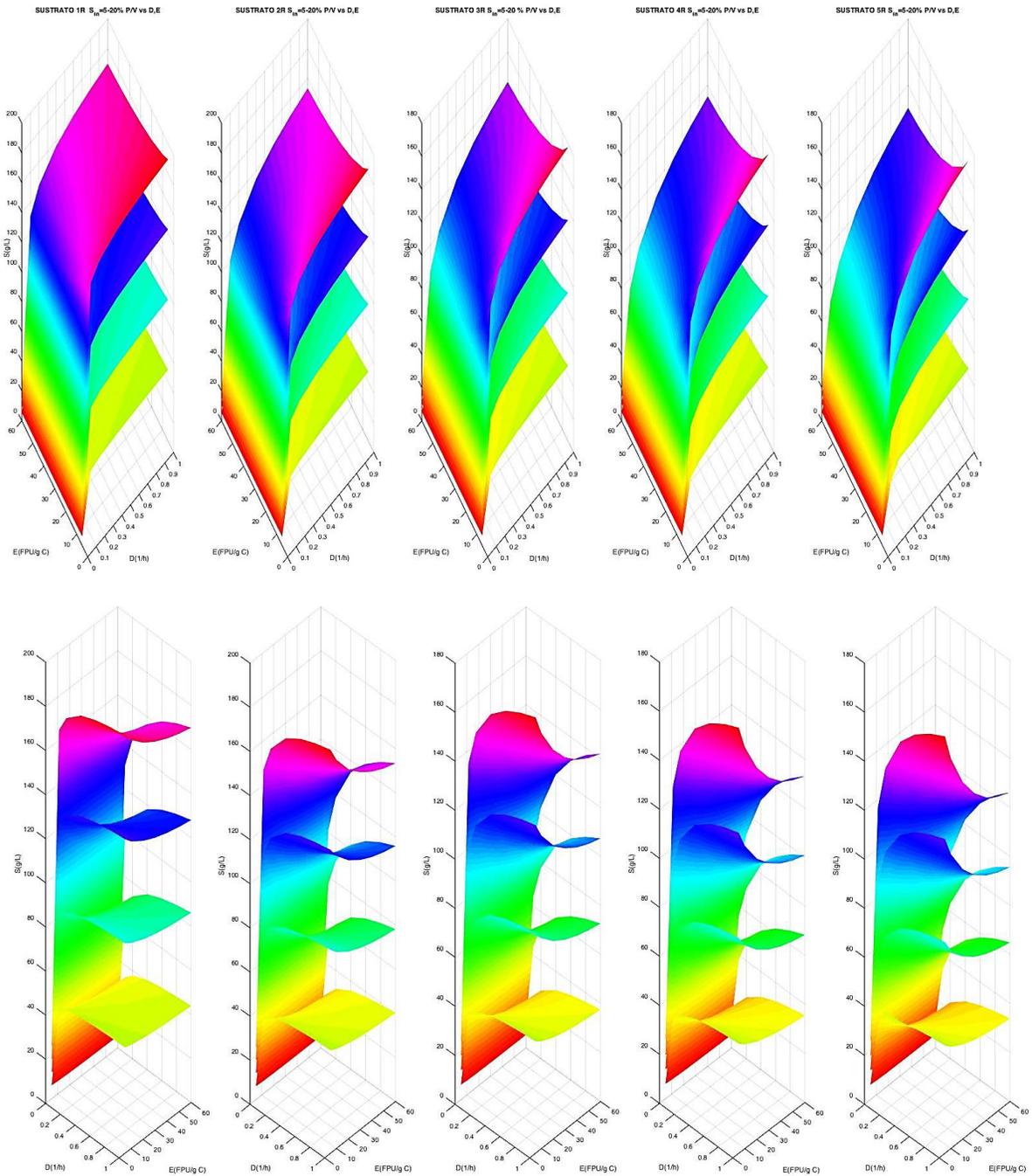


Figura 4.5 Resultados de concentración de sustrato para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

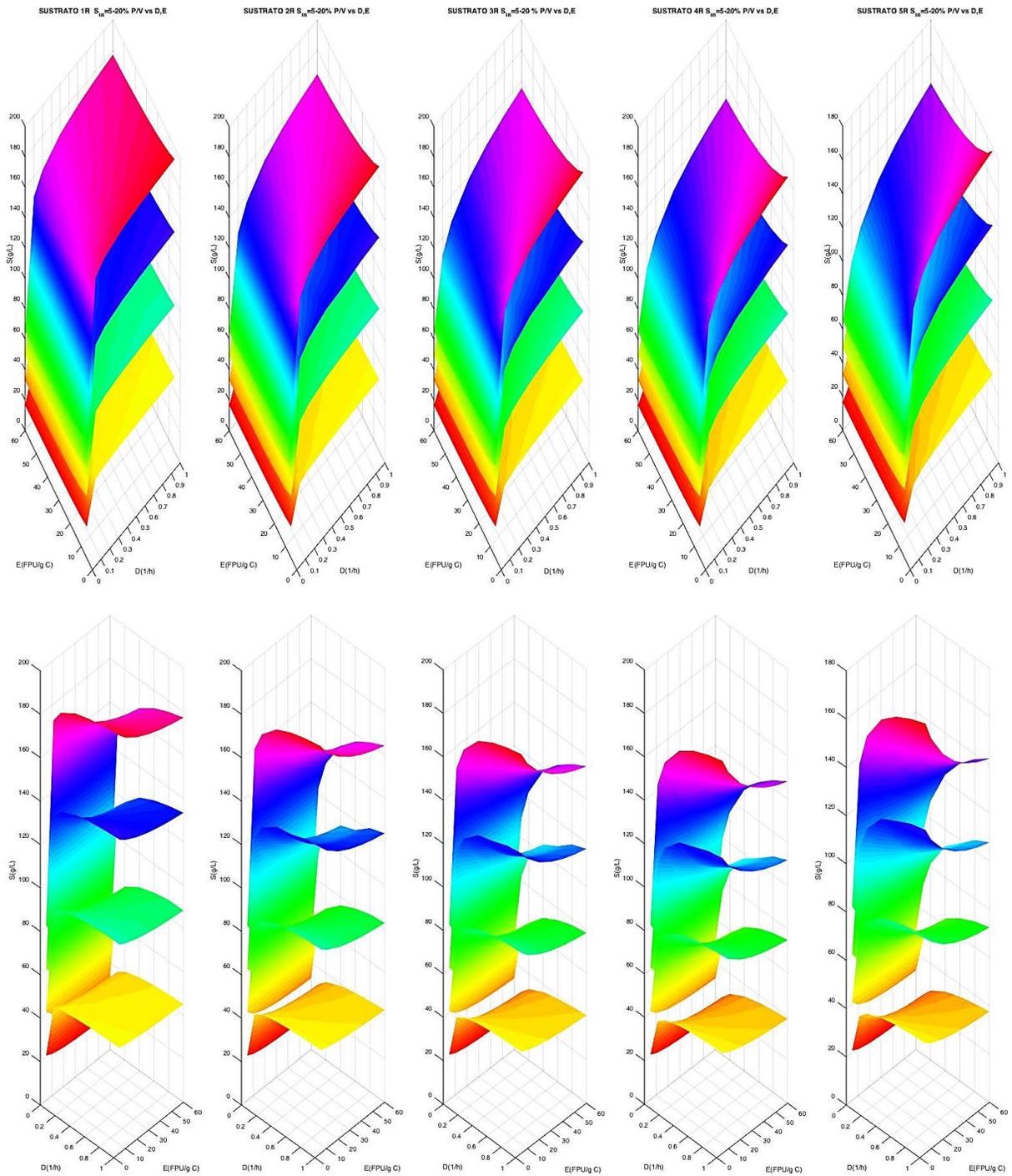


Figura 4.6 Resultados de concentración de sustrato para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

Se eligió realizar las simulaciones hasta un tren de cinco reactores, debido a que el incremento en términos de porcentaje para la concentración de glucosa va disminuyendo cada vez más al aumentar el número de reactores. Tomando como base que la concentración de glucosa obtenida a partir de la operación en lote sea el 100% de lo que pueda obtener, se calcularon los porcentajes de glucosa para los reactores en continuo a las diferentes velocidades de dilución, después se calculó la diferencia de porcentajes entre el reactor 2 y reactor 1 (ΔR_{2-1}), reactor 3 y reactor 2 (ΔR_{3-2}), reactor 4 y reactor 3 (ΔR_{4-3}), reactor 5 y reactor 4 (ΔR_{5-4}), esto para determinar que tanto se incrementaba el porcentaje de glucosa al aumentar la cantidad de reactores y determinar la conveniencia de seguir extendiendo dicha cantidad.

Como se puede apreciar en la Figura 4.7, en donde se tomó como caso particular de análisis la glucosa obtenida a partir de una carga de 10% p/v de BCA, con 60 FPU a diferentes velocidades de dilución, al aumentar la cantidad de reactores la diferencia de los porcentajes de glucosa obtenidos es cada vez menor llegando a ser menos de 2% para la ΔR_{4-3} y ΔR_{5-4} , por lo que agregar un sexto reactor resultaría poco factible ya que el incremento del porcentaje de glucosa sería mínimo, este comportamiento ocurre también para el PCA.

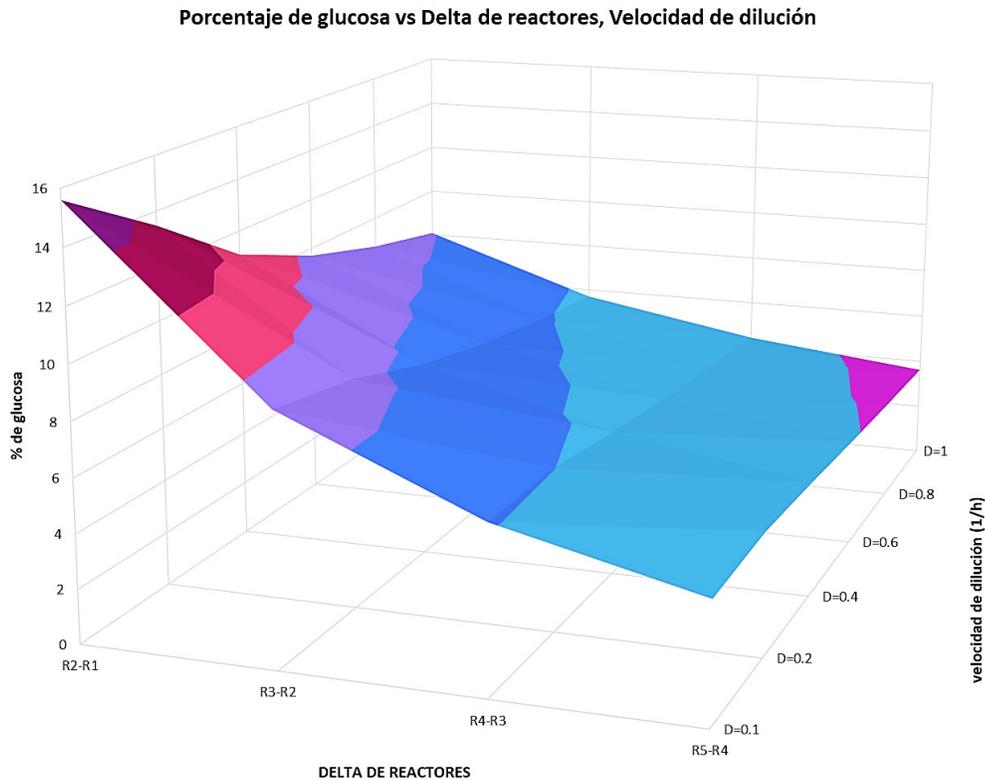


Figura 4.7 Resultados de la diferencia de porcentaje de glucosa obtenida a partir de BCA entre reactores con una carga de 10% p/v de sólidos, 60 FPU con $D=0.1-1$ 1/h.

4.2.2.4 Concentración de celulosa en la corriente de salida

Para la concentración de celulosa en la corriente de salida de la sacarificación para BCA y PCA, las cuales se muestran en la Figura 4.8 y 4.9, se tiene el mismo comportamiento que con el caso de la concentración de sustrato. La relación entre la concentración de celulosa y la velocidad de dilución es directamente proporcional, y es inversamente proporcional respecto a la concentración de complejo enzimático. Igualmente, al aumentar el número de reactores, es menor la concentración de celulosa en la corriente de salida. La concentración de celulosa después de haber llevado a cabo la hidrólisis enzimática es menor para el PCA, ya que este tiene un menor contenido de celulosa.

4.2.2.5 Concentración de hemicelulosa en la corriente de salida

La relación entre la concentración de hemicelulosa con respecto a la velocidad de dilución y carga de complejo enzimático, es la misma que en el caso de la concentración de sustrato y celulosa; al igual que con el aumento del número de reactores se tiene una menor concentración de hemicelulosa. La concentración de hemicelulosa es menor para el PCA, ya que, desde antes de comenzar la hidrólisis enzimática, este contenía una menor cantidad en su composición, como se muestra en las Figuras 4.10 y 4.11.

4.2.2.6 Concentración de glucosa en la corriente de salida

En las Figuras 4.12 y 4.13 se muestran los resultados obtenidos de la simulación de la hidrólisis enzimática para BCA y PCA, se puede observar que la menor concentración de glucosa se tiene cuando la velocidad de dilución es cero, es decir cuando se tiene una operación en lote. Al llevar a cabo la operación en continuo la concentración de glucosa disminuye considerablemente, esta diferencia es menos significativa al aumentar el número de reactores. Por lo tanto, la relación entre la concentración de glucosa y la velocidad de dilución es inversamente proporcional.

La relación entre la concentración de glucosa y del complejo enzimático es directamente proporcional, ya que, al aumentar la carga enzimática, la concentración de glucosa también aumenta. Cabe señalar que, al aumentar el número de reactores, la concentración de glucosa también aumenta, por lo que se tiene la mayor concentración de glucosa a velocidades de dilución bajas, pero con altas concentraciones de complejo enzimático.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

En cuanto al BCA y PCA, la mayor concentración de glucosa se obtiene a partir del BCA, lo cual era de suponerse al observar las Tablas 4.12 y 4.13, ya que es el BCA el que tiene el mayor contenido de celulosa, que es de donde se obtiene la glucosa, existe una variación en un intervalo de 8 a 17% más de glucosa de BCA con respecto al PCA.

4.2.2.7 Concentración de xilosa en la corriente de salida

Con respecto a la concentración de xilosa, igualmente que, con la concentración de glucosa, la relación que existe entre concentración y la velocidad de dilución es inversamente proporcional, ya que al aumentar la velocidad de dilución la concentración de xilosa disminuye considerablemente de la operación en lote a la operación continuo, para después seguir descendiendo de forma menos pronunciada, la diferencia mencionada es menos marcada con el aumento del número de reactores.

Por lo que se refiere a la relación de la concentración de xilosa y la concentración de complejo enzimático, es directamente proporcional, con el aumento de la carga de complejo enzimático se incrementa la concentración de xilosa. Por consiguiente, para tener altas concentraciones de xilosa se debe trabajar con bajas velocidades de dilución y altas concentraciones de complejo enzimático.

En cuanto a las diferencias entre BCA y PCA, se obtiene una mayor concentración de xilosa a partir del BCA, ya que este tiene un mayor contenido de hemicelulosa que es de donde se obtiene la xilosa, todo esto puede observarse en las Figuras 4.14 y 4.15.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

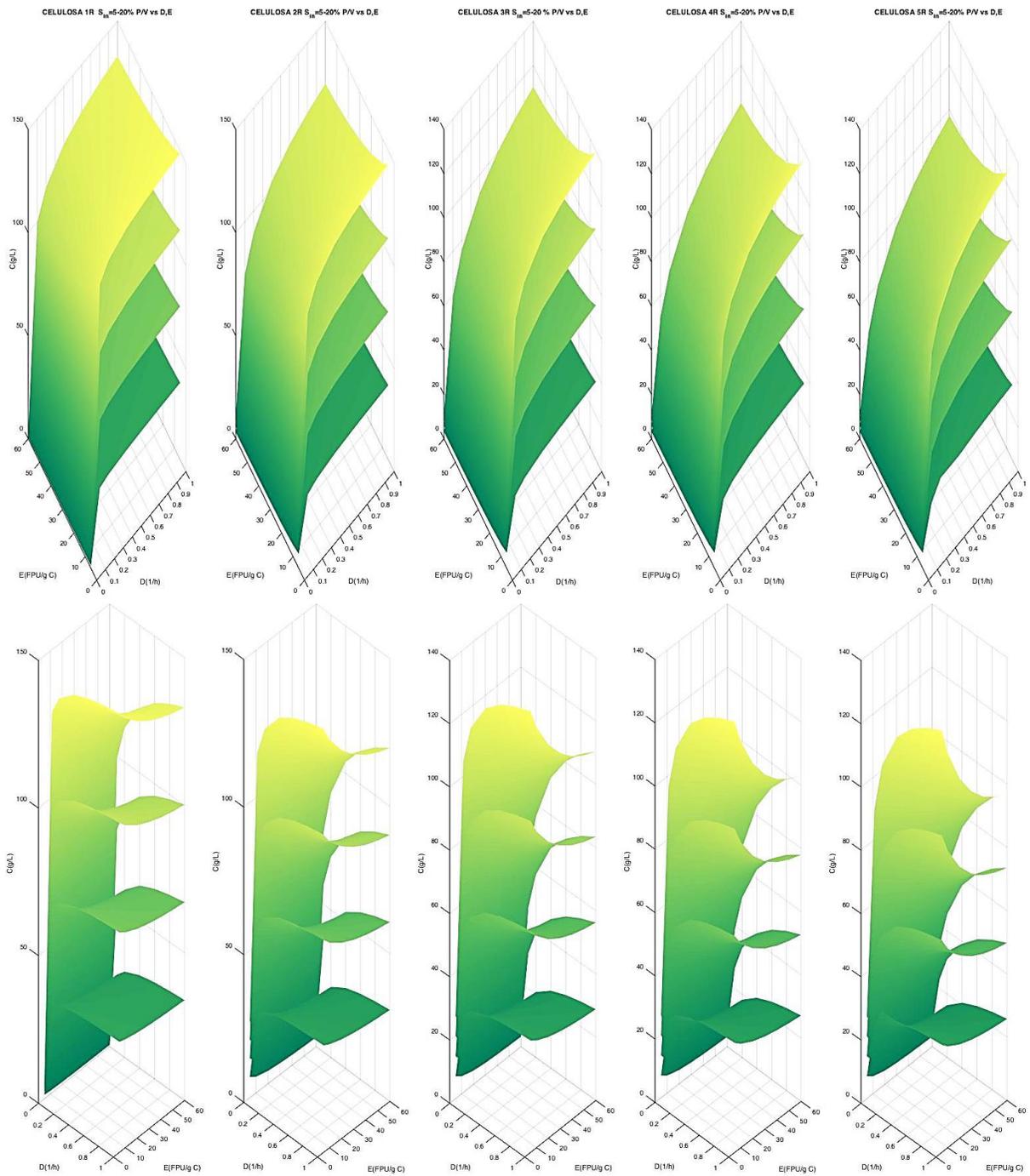


Figura 4.8 Resultados de concentración de celulosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

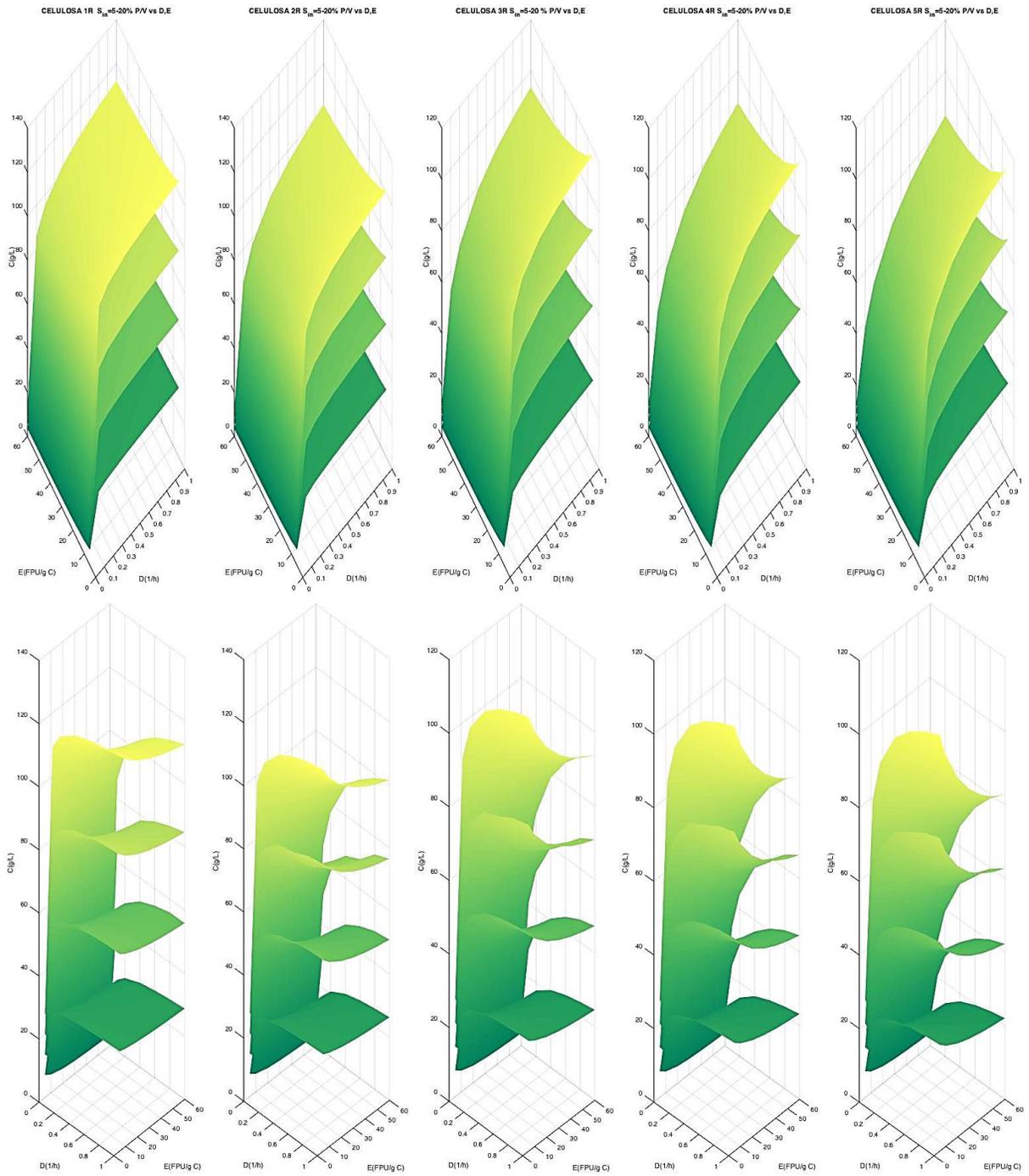


Figura 4.9 Resultados de concentración de celulosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

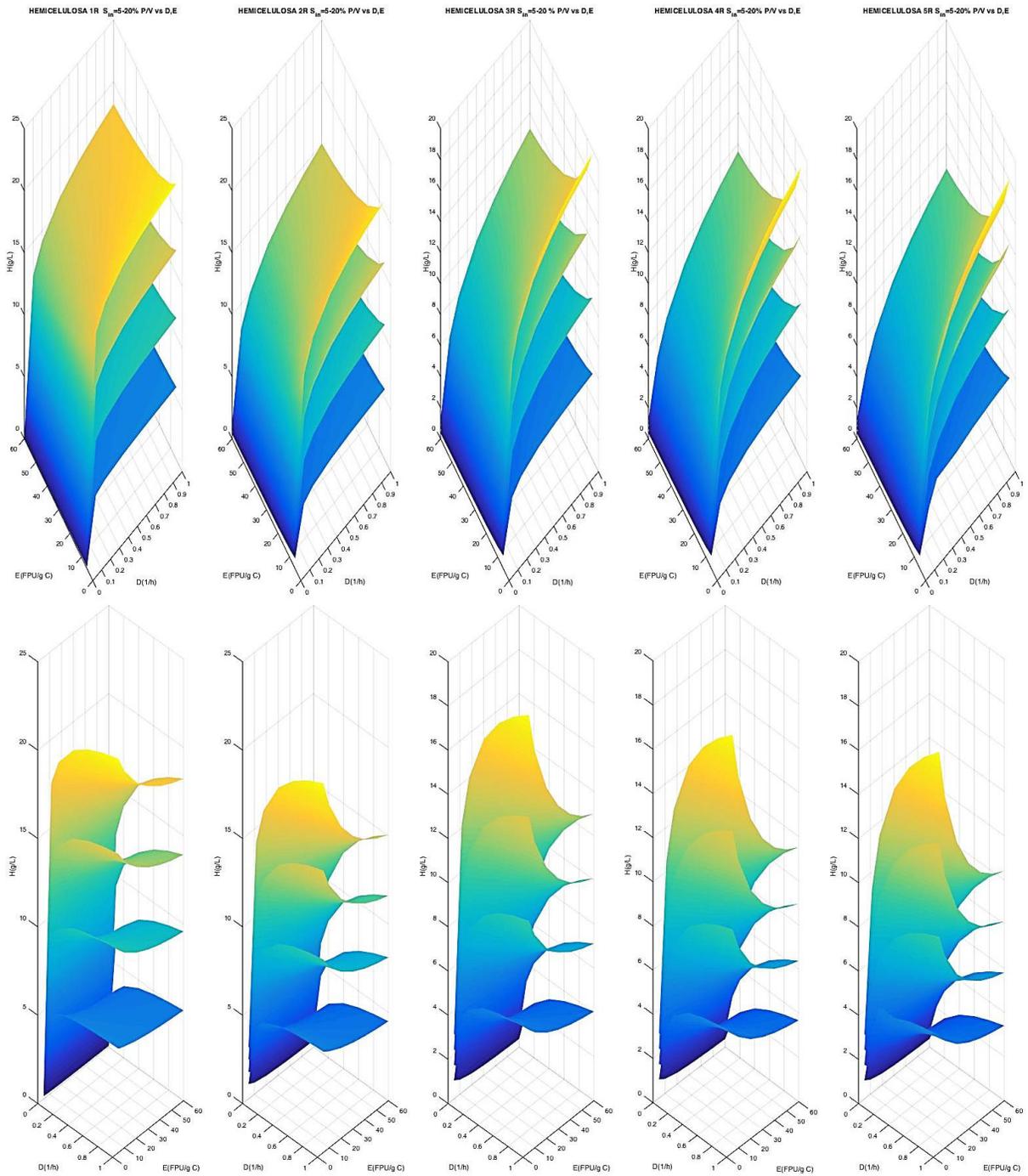


Figura 4.10 Resultados de concentración de hemicelulosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

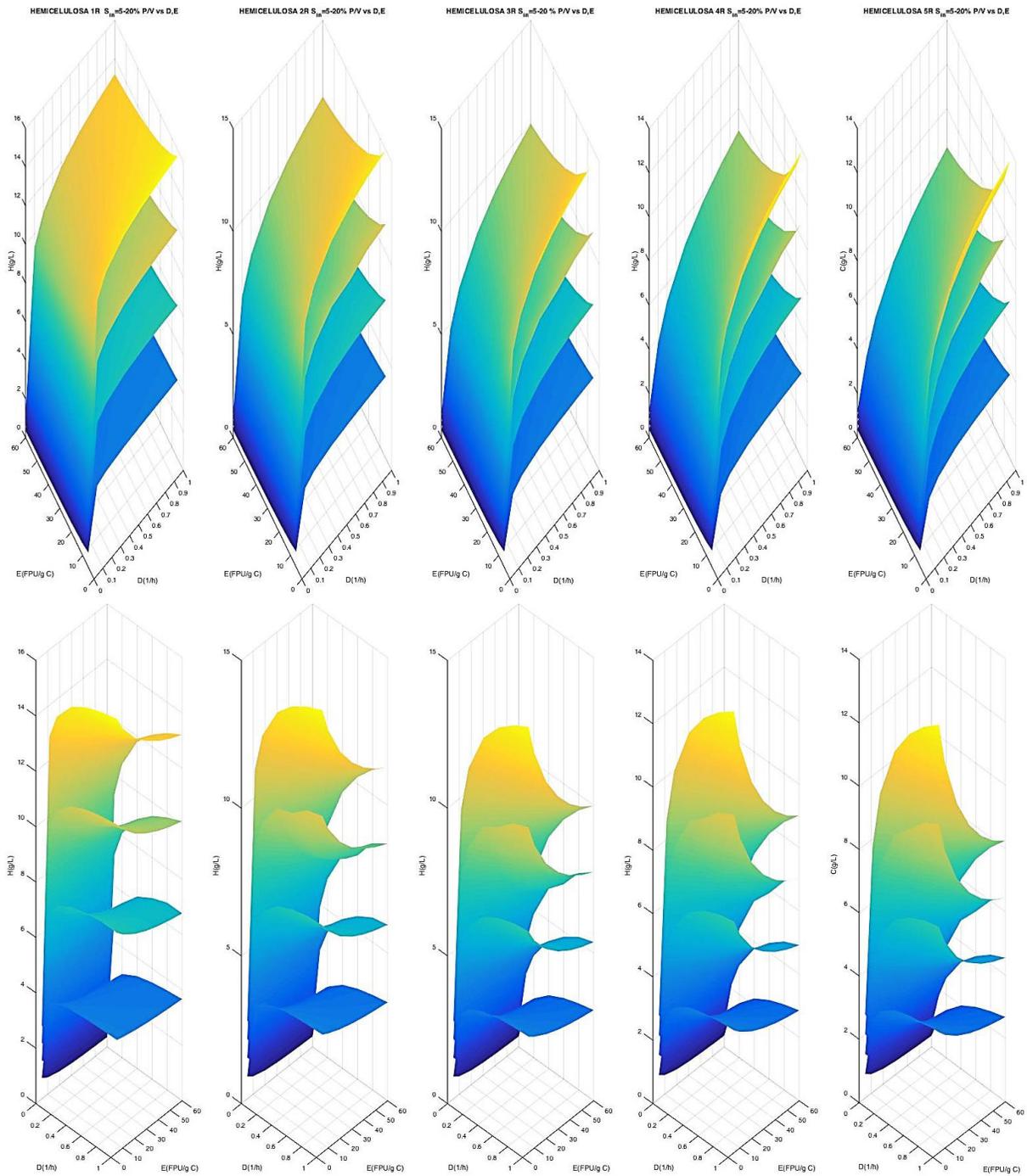


Figura 4.11 Resultados de concentración de hemicelulosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

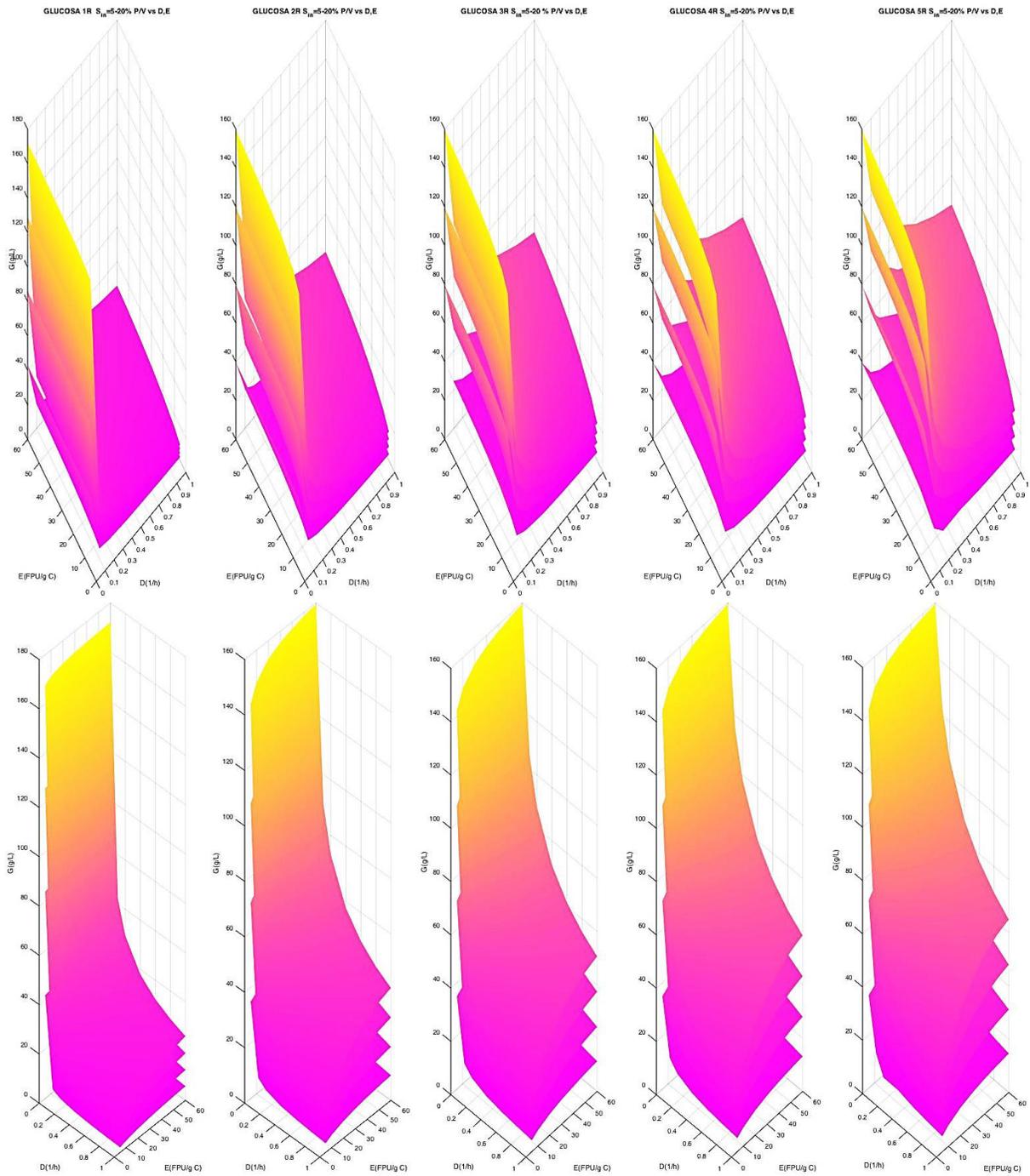


Figura 4.12 Resultados de concentración de glucosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

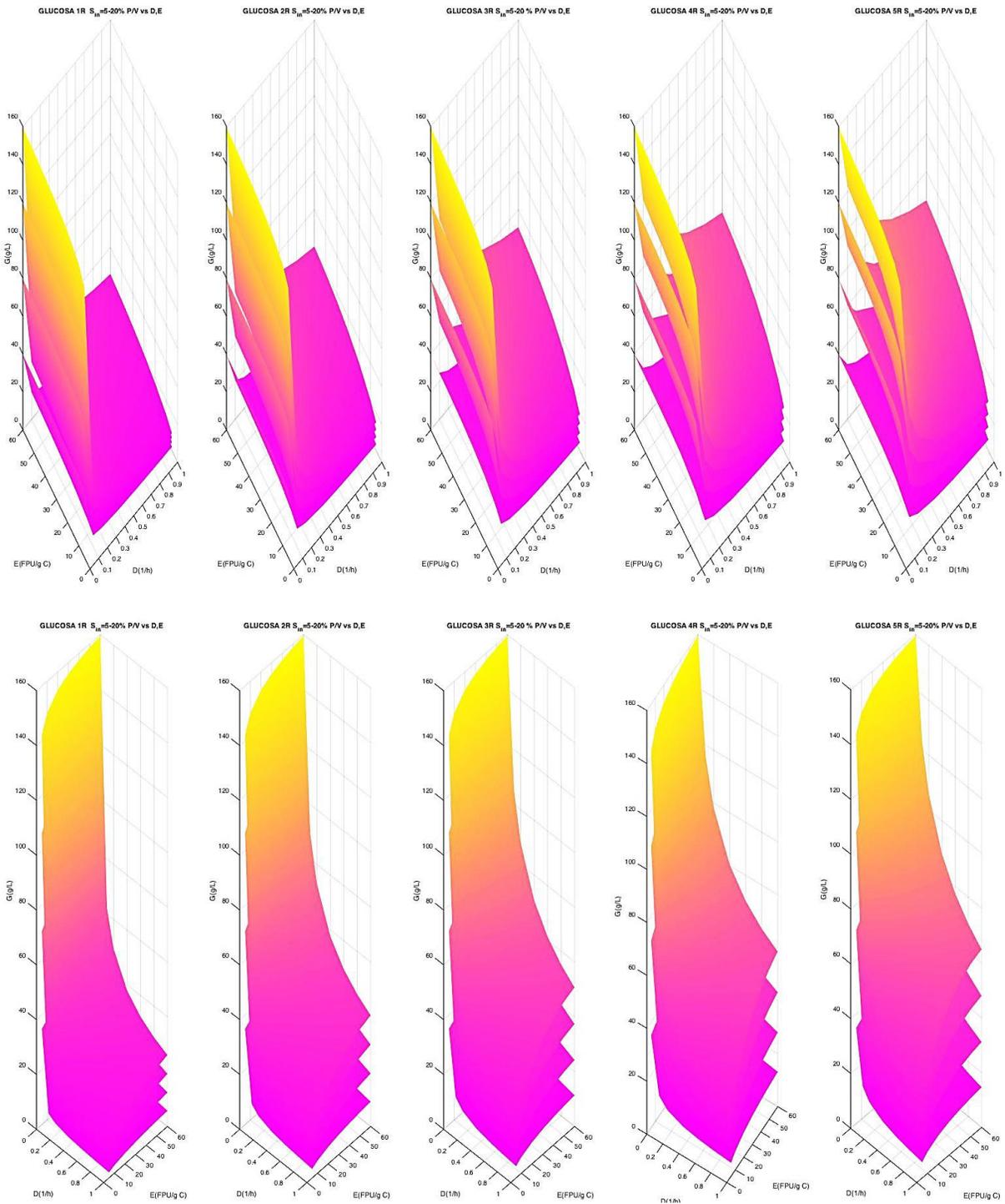


Figura 4.13 Resultados de concentración de glucosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

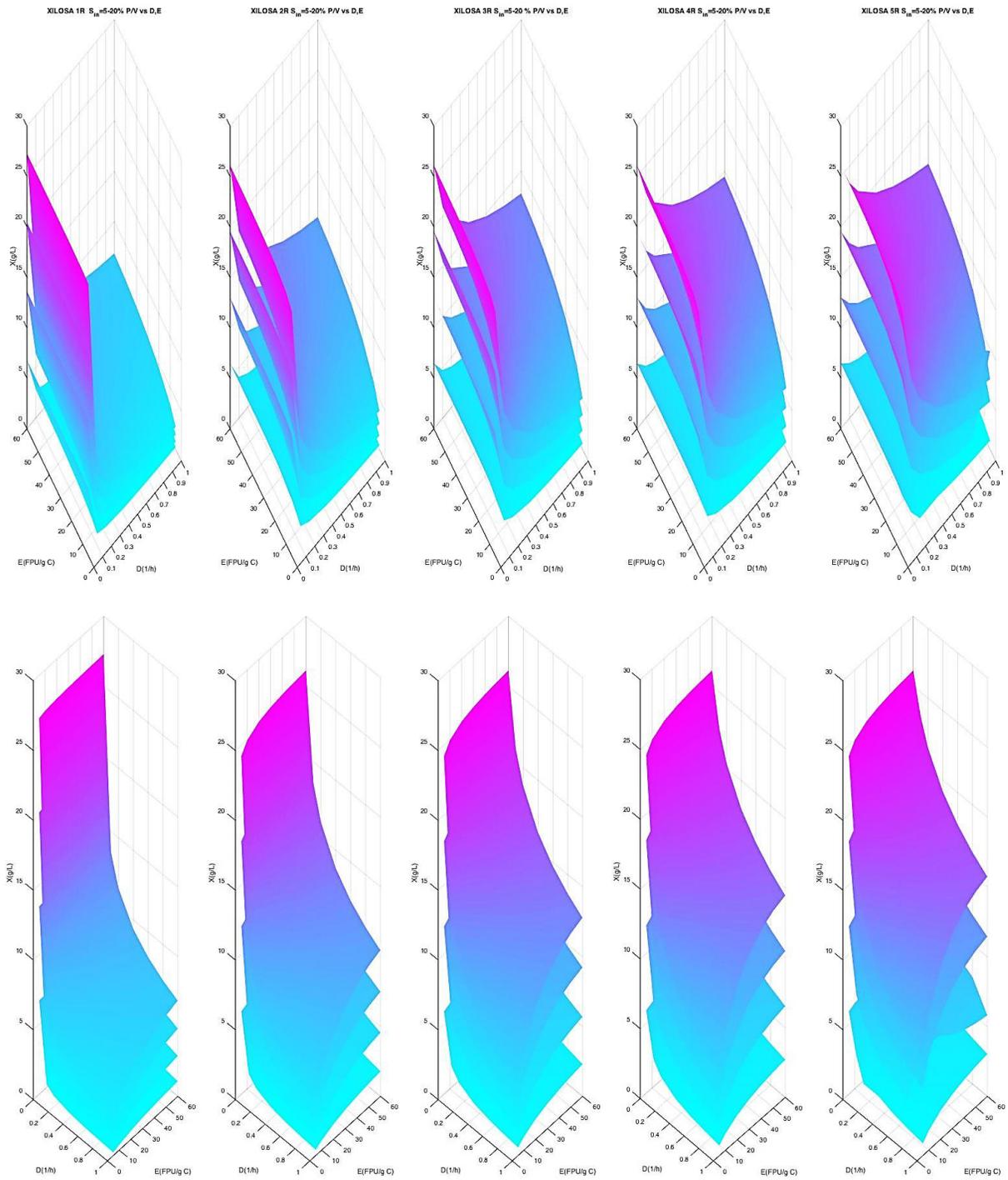


Figura 4.14 Resultados de concentración de xilosa para BCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

Sacarificación: Hidrólisis enzimática

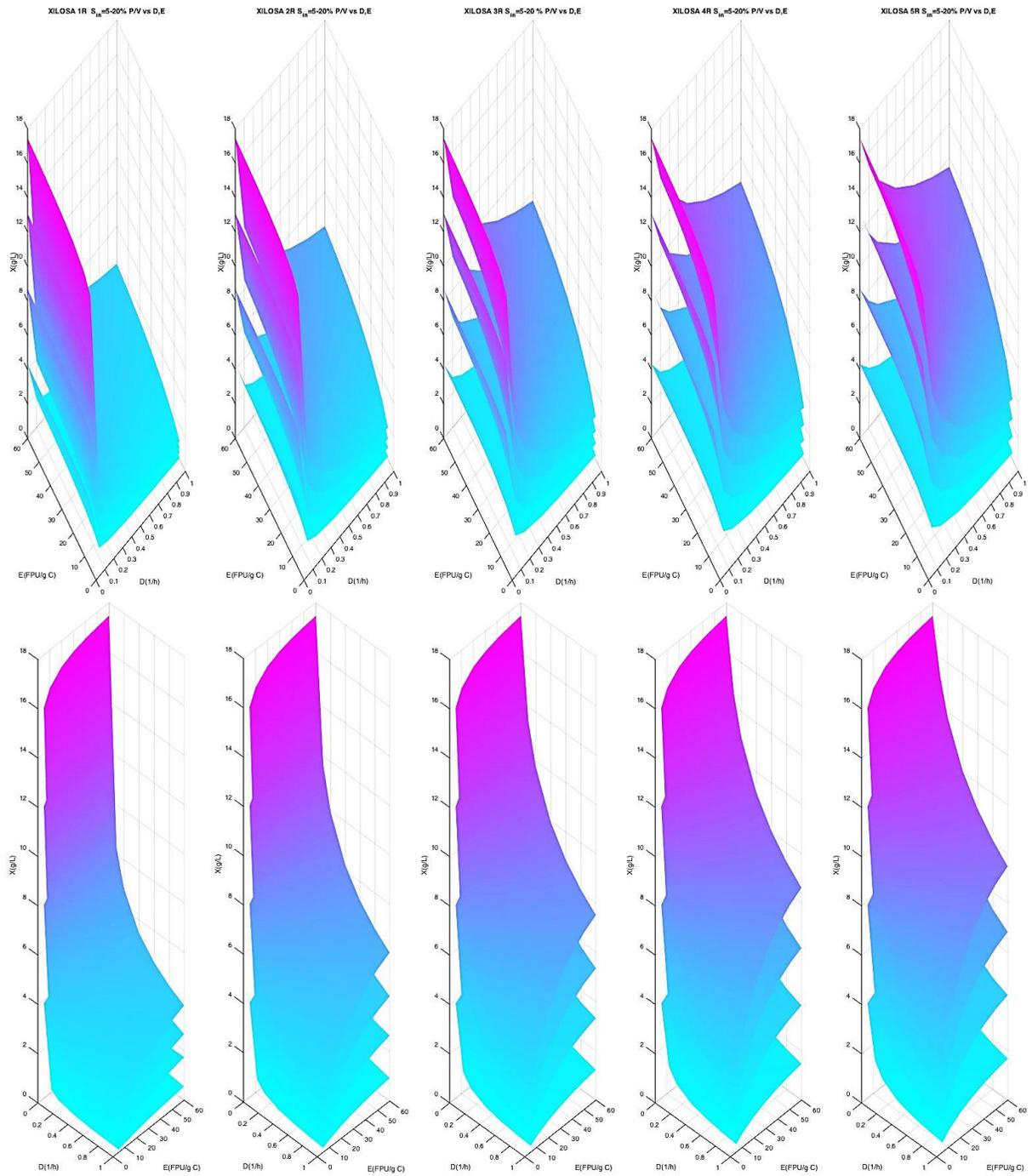


Figura 4.15 Resultados de concentración de xilosa para PCA en un tren de reactores con cargas de 5-20% p/v de sólidos, 5-60 FPU con $D=0-1$ 1/h.

4.3 Conclusiones

En conclusión, si se desea llevar a cabo una sacarificación la mejor operación para realizarla es en lote, ya que con esta se obtienen las más altas concentraciones de glucosa, la cual se empleará en la etapa de fermentación para la producción de etanol. Sin embargo, la operación en lote requiere un mayor tiempo de residencia para la obtención de glucosa, es por ello por lo que la operación en continuo resulta ser una alternativa, si bien se obtienen concentraciones mucho más bajas de glucosa, en el siguiente capítulo se plantea una concentración de azúcares para eliminar las elevadas concentraciones que se encuentran en los hidrolizados.

En el caso de la concentración de xilosa se tiene la misma tendencia que con la concentración de glucosa, por lo que también es conveniente operar a bajas velocidades de dilución y altas concentraciones de complejo enzimático.

Las concentraciones de sustrato que serían BCA y PCA no convertidos, corresponden a las concentraciones de celulosa y hemicelulosa no convertidos, así como de la lignina que permanece constante, a velocidades de dilución bajas la concentración de sustrato es menor, y con concentraciones de complejo enzimático altas la concentración también es menor. Coincidiendo en que las mejores condiciones de operación son a velocidades de dilución bajas con altas concentraciones de complejo enzimático.

Por otro lado, si bien estos resultados pertenecen a una simulación, en un proceso real se sugiere trabajar con cargas de sólidos de 10% p/v, ya que la cantidad de sólidos no convertidos es elevada y esto podría ocasionar problemas de bombeo y transporte de un equipo a otro.

Las mayores concentraciones de glucosa y xilosa se obtienen a partir del BCA, las menores concentraciones de celulosa y hemicelulosa se obtienen a partir del PCA, esto por la composición de cada uno de los sustratos.

Debido al alto contenido de sólidos, se propone una etapa de filtración seguida de la sacarificación como se mostró en las Figuras 1.6, donde se supondrá que se separara toda la celulosa, hemicelulosa y lignina, y que la glucosa y xilosa se encuentran completamente disueltas en el agua, por lo que este caldo de azúcares reductores provenientes de los hidrolizados de BCA y PCA pasará a una etapa de concentración por evaporación como se describe en el siguiente capítulo.

Debido a la observación de los resultados obtenidos mediante la construcción de superficies de respuesta, no se llevó a cabo una optimización, ya que no se identificaron puntos críticos a causa de que el comportamiento es únicamente decreciente o creciente en función de la velocidad de dilución y la concentración del complejo enzimático.

5. Evaporación para la concentración de azúcares reductores

De los resultados obtenidos en la sacarificación, se pudo observar que se tiene un alto contenido de agua en el hidrolizado, por lo que resulta conveniente realizar una concentración de azúcares reductores para que estos pasen después a la etapa de fermentación, ya que si pasan directamente a la etapa de fermentación, se obtendrán corrientes con bajas concentraciones de etanol en comparación con la concentración de agua, lo cual ocasionará una alta demanda de energía para llevar a cabo la separación por destilación.

Es por ello que en este trabajo se propone la concentración de azúcares reductores mediante el uso de un evaporador de triple efecto con alimentación hacia adelante.

En la primera sección de este capítulo se describe el método de cálculo empleado para concentrar los azúcares reductores, en una segunda sección se realiza una simulación de dicha etapa suponiendo los valores de la fracción correspondiente a la corriente líquida y obtener una visualización completa del comportamiento del proceso, en la tercera sección se calculan las condiciones de operación del evaporador de triple efecto para obtener ciertas concentraciones de glucosa específicas.

5.1 Marco de diseño

5.1.1 Descripción del proceso de evaporación

Se considera un evaporador de efecto triple y alimentación hacia adelante para evaporar agua de cada una de las corrientes de hidrolizado previamente filtradas, que contienen glucosa, xilosa y agua.

Evaporación

En la Figura 5.1 se muestra un evaporador de efecto triple, en este sistema cada efecto actúa como un evaporador de efecto simple. En el primer efecto se usa vapor de agua como medio de calentamiento (S), temperatura de ebullición T_1 a presión P_1 . El vapor extraído del primer efecto se usa como medio de calentamiento, se condensa en el segundo efecto y se vaporiza agua a temperatura T_2 y presión P_2 en este efecto. Para transferir calor del vapor que se condensa al líquido en ebullición en este segundo efecto, la temperatura de ebullición T_2 debe ser inferior a la de condensación. Esto significa que la presión P_2 del segundo efecto debe ser menor que la presión P_1 del primer efecto.

De manera similar, el vapor del segundo efecto se condensa al calentar el tercer efecto, por consiguiente, la presión P_3 es inferior a la presión P_2 .

En el primer efecto se introduce la alimentación nueva que se concentra parcialmente, después el líquido más concentrado fluye al segundo evaporador en serie, donde se concentra más, el líquido del segundo efecto fluye al tercer efecto para llegar a su concentración final.

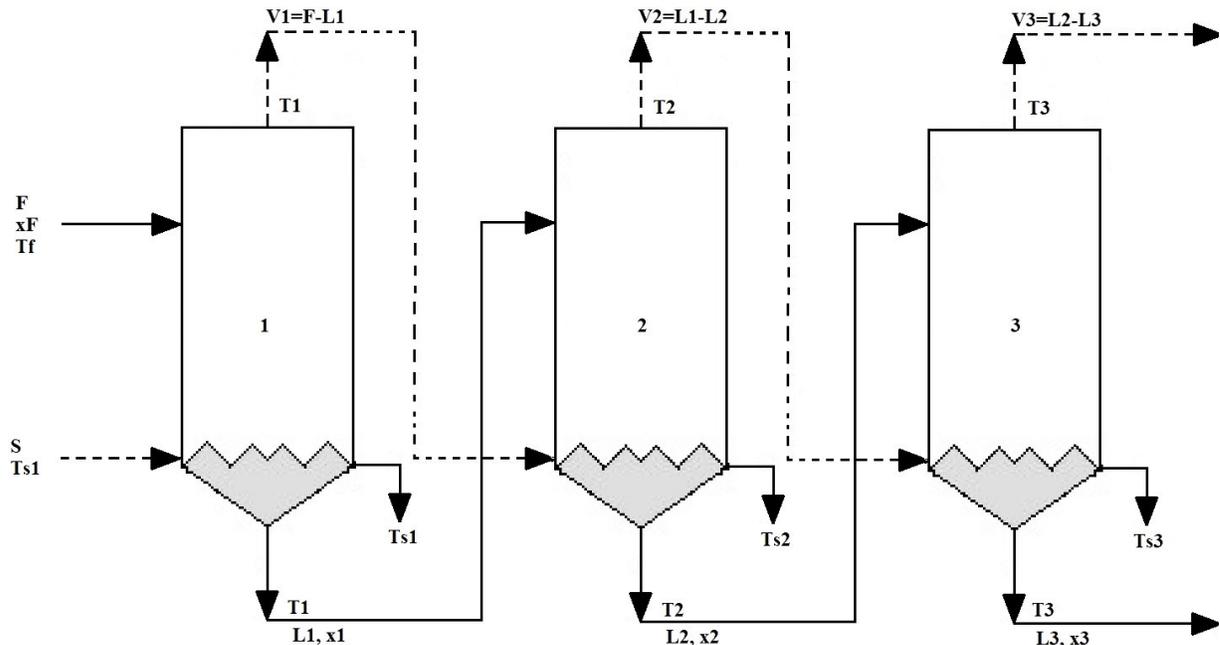


Figura 5.1 Diagrama simplificado de un evaporador de efecto triple con alimentación hacia adelante.

Al efectuar los cálculos para un sistema de evaporador de efecto múltiple, los valores necesarios son el área de la superficie de calentamiento en cada efecto, los kilogramos de vapor de agua por hora que deben suministrarse y la cantidad de vapor que sale de cada efecto, en especial del último.

Evaporación

Los valores conocidos para este caso de estudio serán:

1. Las condiciones de alimentación y flujo en el primer efecto
2. Fracción del líquido que sale del último efecto
3. Concentración deseada en el líquido que sale del último efecto
4. Propiedades físicas como entalpías de líquidos y vapores

Los cálculos se llevarán a cabo por medio de balances de materia, balances de calor y ecuaciones de capacidad $q = UA\Delta T$ para cada efecto, un método conveniente es el planteado en Geankoplis (2016), en donde se sugiere resolver dichas ecuaciones por aproximaciones sucesivas.

5.1.2 Método de cálculo paso a paso para evaporadores de efecto triple

Para realizar el diseño del evaporador, se tomó como un caso de estudio inicial calcular la cantidad de vapor S que debía ser alimentado en el primer efecto, la cantidad de líquido L_1, L_2, L_3 que sale de cada efecto, la cantidad de vapor V_1, V_2, V_3 que sale de cada efecto, el punto de ebullición T_1, T_2, T_3 de cada efecto, las temperaturas de saturación T_{s1}, T_{s2}, T_{s3} que sale de cada efecto, mediante la aplicación del método de aproximaciones sucesivas, estableciendo el valor de la fracción x_3 en la corriente líquida, para ello se comienza con un balance total de materia con el que se determina la cantidad total de vapor que se evapora, mediante la ecuación 5.1.

$$F = L_3 + (V_1 + V_2 + V_3) \quad (5.1)$$

Multiplicando cada una de las variables por sus fracciones se obtiene

$$\begin{aligned} Fx_F &= L_3x_3 + (V_1 + V_2 + V_3)(0) \\ L_3 &= \frac{Fx_F}{x_3} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Una vez que se ha obtenido L_3 , es posible calcular el total vaporizado mediante la ecuación 5.1

$$V_1 + V_2 + V_3 = F - L_3 \quad (5.3)$$

Lo siguiente es calcular x_3 para cada componente, en este caso glucosa, xilosa y agua,

$$\text{Glucosa: } x_{3G} = \frac{Fx_{FG}}{L_3} \quad (5.4)$$

$$\text{Xilosa: } x_{3X} = \frac{Fx_{FX}}{L_3} \quad (5.5)$$

$$\text{Agua: } x_{3A} = \frac{Fx_{FA}}{L_3} \quad (5.6)$$

Evaporación

Si se suponen cantidades iguales vaporizadas en cada efecto, $V_1 = V_2 = V_3$, efectuando un balance total de material en los efectos 1, 2 y 3 y resolviendo se pueden obtener L_1 , L_2 y L_3

$$\text{Efecto 1: } F = V_1 + L_1 \quad (5.7)$$

$$\text{Efecto 2: } L_1 = V_2 + L_2 \quad (5.8)$$

$$\text{Efecto 3: } L_2 = V_3 + L_3 \quad (5.9)$$

Después de realizar el balance de materia por efecto, es necesario calcular la fracción x de cada componente en cada uno de los efectos

Cálculo de x por componente en efecto 1

$$\text{Global: } x_1 = \frac{Fx_{F1}}{L_1} \quad (5.10)$$

$$\text{Glucosa: } x_{1G} = \frac{Fx_{FG}}{L_1} \quad (5.11)$$

$$\text{Xilosa: } x_{1X} = \frac{Fx_{FX}}{L_1} \quad (5.12)$$

$$\text{Agua: } x_{1A} = \frac{Fx_{FA}}{L_1} \quad (5.13)$$

Cálculo de x por componente en efecto 2

$$\text{Global: } x_2 = \frac{L_1 x_1}{L_2} \quad (5.14)$$

$$\text{Glucosa: } x_{2G} = \frac{L_1 x_{1G}}{L_2} \quad (5.15)$$

$$\text{Xilosa: } x_{2X} = \frac{L_1 x_{1X}}{L_2} \quad (5.16)$$

$$\text{Agua: } x_{2A} = \frac{L_1 x_{1A}}{L_2} \quad (5.17)$$

Cálculo de x por componente en efecto 3

$$\text{Global: } x_3 = \frac{L_2 x_2}{L_3} \quad (5.18)$$

$$\text{Glucosa: } x_{3G} = \frac{L_2 x_{2G}}{L_3} \quad (5.19)$$

$$\text{Xilosa: } x_{3X} = \frac{L_2 x_{2X}}{L_3} \quad (5.20)$$

$$\text{Agua: } x_{3A} = \frac{L_2 x_{2A}}{L_3} \quad (5.21)$$

Una vez que se han realizado los balances de materia, se procede a efectuar los balances de energía comenzando por el cálculo de elevación del punto de ebullición EPE de cada efecto

$$\text{Efecto 1: } EPE_1 = 1.78x_1 + 6.22x_1^2 \quad (5.22)$$

$$\text{Efecto 2: } EPE_2 = 1.78x_2 + 6.22x_2^2 \quad (5.23)$$

$$\text{Efecto 3: } EPE_3 = 1.78x_3 + 6.22x_3^2 \quad (5.24)$$

$$\sum \Delta T_{disponible} = T_{s1} - T_3 - \sum EPE \quad (5.25)$$

Evaporación

Las caídas de temperatura ΔT en un evaporador de efecto múltiple son de manera aproximada, inversamente proporcionales a los valores de los coeficientes de transferencia de calor U , por lo que cada ΔT es proporcional a $1/U$ como se muestra a continuación:

$$\text{Efecto 1: } \Delta T_1 = \frac{1}{U_1} \quad (5.26)$$

$$\text{Efecto 2: } \Delta T_2 = \frac{1}{U_2} \quad (5.27)$$

$$\text{Efecto 3: } \Delta T_3 = \frac{1}{U_3} \quad (5.28)$$

Con las caídas de temperatura es posible calcular el punto de ebullición real de la solución en cada efecto

$$\text{Efecto 1: } T_1 = T_{s1} - \Delta T_1 \quad (5.29)$$

$$\text{Efecto 2: } T_2 = T_1 - EPE_1 - \Delta T_2 \quad (5.30)$$

$$\text{Efecto 3: } T_3 = T_2 - EPE_2 - \Delta T_3 \quad (5.31)$$

Ya que la temperatura de saturación del efecto 1 es conocida, con las temperaturas del efecto de ebullición del efecto 2 y 3, es posible calcular las temperaturas de saturación restantes

$$\text{Efecto 2: } T_{s2} = T_1 - EPE_1 \quad (5.32)$$

$$\text{Efecto 3: } T_3 = T_2 - EPE_2 \quad (5.33)$$

Lo siguiente es calcular la capacidad calorífica del líquido en cada, haciendo uso de la masa molar M y la capacidad calorífica C_p de cada componente

Efecto 1

$$\begin{aligned} \text{Glucosa: } n_{1G} &= \frac{L_1 x_{1G}}{M_G} & f_{1MG} &= \frac{n_{1G}}{\sum f_{1M}} \\ \text{Xilosa: } n_{1X} &= \frac{L_1 x_{1X}}{M_X} & f_{1MX} &= \frac{n_{1X}}{\sum f_{1M}} \\ \text{Agua: } n_{1A} &= \frac{L_1 x_{1A}}{M_A} & f_{1MA} &= \frac{n_{1A}}{\sum f_{1M}} \\ C_{p1} &= C_{pG} f_{1MG} + C_{pX} f_{1MX} + C_{pA} f_{1MA} \end{aligned} \quad (5.34)$$

Efecto 2

$$\begin{aligned} \text{Glucosa: } n_{2G} &= \frac{L_2 x_{2G}}{M_G} & f_{2MG} &= \frac{n_{2G}}{\sum f_{2M}} \\ \text{Xilosa: } n_{2X} &= \frac{L_2 x_{2X}}{M_X} & f_{2MX} &= \frac{n_{2X}}{\sum f_{2M}} \\ \text{Agua: } n_{2A} &= \frac{L_2 x_{2A}}{M_A} & f_{2MA} &= \frac{n_{2A}}{\sum f_{2M}} \\ C_{p2} &= C_{pG} f_{2MG} + C_{pX} f_{2MX} + C_{pA} f_{2MA} \end{aligned} \quad (5.35)$$

Efecto 3

$$\begin{aligned} \text{Glucosa: } n_{3G} &= \frac{L_3 x_{3G}}{M_G} & f_{3MG} &= \frac{n_{3G}}{\sum f_{3M}} \\ \text{Xilosa: } n_{3X} &= \frac{L_3 x_{3X}}{M_X} & f_{3MX} &= \frac{n_{3X}}{\sum f_{3M}} \end{aligned}$$

Evaporación

$$\begin{aligned} \text{Agua: } n_{3A} &= \frac{L_3 x_{3A}}{M_A} & f_{3MA} &= \frac{n_{3A}}{\sum f_{3M}} \\ Cp_3 &= Cp_G f_{3MG} + Cp_X f_{3MX} + Cp_A f_{3MA} \end{aligned} \quad (5.36)$$

Los valores de entalpía H de las diversas corrientes de vapor saturado H_{s1} , H_{s2} , H_{s3} y H_{s4} (condensador) y líquido saturado h_{s1} , h_{s2} y h_{s3} con respecto al agua a 0°C como base se obtienen de las tablas de vapor, con esta información se procede a calcular las entalpías y calores latentes de condensación λ_s por efecto.

Efecto 1

$$H_1 = H_{s2}(\text{entalpía de saturación a } T_{s2}) + 1.884EPE_1 \quad (5.37)$$

$$\lambda_{s1} = H_{s1}(\text{entalpía de saturación del vapor}) - h_{s1}(\text{entalpía del líquido a } T_{s1}) \quad (5.38)$$

Efecto 2

$$H_2 = H_{s3} + 1.884EPE_2 \quad (5.39)$$

$$\lambda_{s2} = H_1 - h_{s2} \quad (5.40)$$

Efecto 3

$$H_3 = H_{s4} + 1.884EPE_3 \quad (5.41)$$

$$\lambda_{s3} = H_2 - h_{s3} \quad (5.42)$$

Es necesario recalcular los valores de L_1 y L_2 , para posteriormente verificar que los valores de V_1 , V_2 y V_3 son muy similares a los supuestos al inicio de los cálculos, lo cual se puede hacer mediante el uso de los valores de las variables involucradas en los balances de energía, como se muestra a continuación

$$L_1 = \frac{-F\lambda_{s2}(Cp_2T_2 - \lambda_{s3} - H_3) - (H_2 - Cp_2T_2)[L_3(Cp_3T_3 - H_3)]}{(Cp_1T_1 - \lambda_{s2} - H_2)(Cp_2T_2 - \lambda_{s3} - H_3) - \lambda_{s3}(H_2 - Cp_2T_2)} \quad (5.43)$$

$$L_2 = \frac{(Cp_1T_1 - \lambda_{s2} - H_2)[L_3(Cp_3T_3 - H_3)] - \lambda_{s3}(-F\lambda_{s2})}{(Cp_1T_1 - \lambda_{s2} - H_2)(Cp_2T_2 - \lambda_{s3} - H_3) - \lambda_{s3}(H_2 - Cp_2T_2)} \quad (5.44)$$

$$V_1 = F - L_1 \quad (5.45)$$

$$V_2 = L_1 - L_2 \quad (5.46)$$

Evaporación

$$V_3 = L_2 - L_3 \quad (5.47)$$

Si los nuevos valores de V_1 , V_2 y V_3 son muy cercanos a los cálculos originalmente se procede a calcular la cantidad de vapor alimentado S , así como las velocidades de transferencia de calor q_1 , q_2 y q_3 de cada efecto, y las áreas A_1 , A_2 y A_3 de cada efecto. En caso de que los nuevos valores de V_1 , V_2 y V_3 sean muy diferentes a los cálculos originalmente, se debe repetir el procedimiento a partir de la ecuación 5.7 hasta que la diferencia entre estos valores sea despreciable. Para calcular la cantidad de vapor alimentado se hace uso de la siguiente ecuación

$$S = \frac{L_1 C_{p1} T_1 + H_1 V_1 - F T_F C_{pF}}{\lambda_{s1}} \quad (5.48)$$

Con el valor de S , es posible calcular las velocidades de transferencia de calor

$$\text{Efecto 1: } q_1 = S \lambda_{s1} \quad (5.49)$$

$$\text{Efecto 2: } q_2 = V_1 \lambda_{s2} \quad (5.50)$$

$$\text{Efecto 3: } q_3 = V_2 \lambda_{s3} \quad (5.50)$$

Por último, es posible calcular las áreas por efecto a partir de $q = UA\Delta T$

$$\text{Efecto 1: } A_1 = \frac{q_1}{U_1 \Delta T_1} \quad (5.51)$$

$$\text{Efecto 2: } A_2 = \frac{q_2}{U_2 \Delta T_2} \quad (5.52)$$

$$\text{Efecto 3: } A_3 = \frac{q_3}{U_3 \Delta T_3} \quad (5.53)$$

5.2 Simulación

Se tomó como caso de estudio cada una de las corrientes que, de salida de la hidrólisis enzimática de cada uno de los reactores, a las diferentes velocidades de dilución ($D=0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$) cargas de complejo enzimático (5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU) y cargas de sólidos (5, 10, 15 y 20% p/v), por lo que se tienen 980 corrientes que después fueron filtradas, donde se supone que las corrientes de alimentación contienen únicamente glucosa, xilosa y agua. El sistema de evaporación de efecto triple puede visualizarse como un sistema con una F , x_F , x_{FG} , x_{FX} , x_{FA} , T_F , U_1 , U_2 , U_3 conocidas, por lo que en este caso es necesario proponer valores de x_3 para poder realizar los cálculos necesarios. Para un primer escenario de cálculo se propusieron valores de $x_3 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8, 0.9$, para las 980 corrientes, por lo que se tienen 6860 escenarios de cálculo, siguiendo los pasos indicados en la sección anterior se obtuvieron los resultados que se muestran a continuación para BCA y PCA.

5.2.1 Concentración de glucosa

Debido a la gran cantidad de escenarios de calculo que se efectuaron, en este apartado se discutirán únicamente los resultados concernientes al escenario donde se alimenta una corriente de hidrolizados filtrados de BCA y PCA provenientes un reactor con $D = 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$ y a 5 FPU y 5% p/v.

En las Tablas 5.1 y 5.2 se muestran los resultados de la simulación de la evaporación a diferentes x_3 , de lo cual se observar que al aumentar esta, la concentración de glucosa también aumenta, por lo que la relación es directamente proporcional, esto ocurre tanto para el BCA como para el PCA.

En cuanto a la velocidad de dilución, la concentración de glucosa disminuye con el aumento de esta, por lo que la relación es inversamente proporcional, tendencia se repite desde la etapa de sacarificación. Se obtiene una mayor concentración de glucosa a partir de PCA, esto debido a que las concentraciones de agua presentes en los caldos de azúcares reductores.

Sin embargo, para fines de fermentación y tomando como base el trabajo de Peñaloza (2014), la máxima concentración de glucosa con la que se puede operar es de alrededor de 219 g/L, y esto únicamente para la operación en lote, por lo que en el caso de la evaporación traería como consecuencia operar con valores de x_3 menores a 0.3.

Tabla 5.1 Concentración de glucosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	88.4029	86.1408	87.6218	89.5809	90.8341	91.7274	92.4081
0.2	183.7541	179.0449	182.1279	186.2067	188.8159	190.6760	192.0933
0.3	286.9064	279.5412	284.3630	290.7425	294.8238	297.7334	299.9505
0.4	398.8580	388.6001	395.3155	404.2011	409.8860	413.9391	417.0275
0.5	520.7849	507.3646	516.1502	527.7758	535.2143	540.5179	544.5593
0.6	654.0826	637.1907	648.2487	662.8827	672.2468	678.9236	684.0118
0.7	800.4195	779.6992	793.2632	811.2151	822.7033	830.8952	837.1382
0.8	961.8073	936.8440	953.1851	974.8148	988.6580	998.5299	1006.0535
0.9	1140.6938	1111.0019	1130.4378	1156.1670	1172.6357	1184.3807	1193.3323

Evaporación

Tabla 5.2 Concentración de glucosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	90.1464	91.5856	93.0696	94.6725	95.5816	96.1912	96.6379
0.2	187.3842	190.3808	193.4707	196.8086	198.7017	199.9711	200.9015
0.3	292.5844	297.2717	302.1053	307.3270	310.2888	312.2749	313.7305
0.4	406.7666	413.2959	420.0293	427.3039	431.4303	434.1974	436.2255
0.5	531.1326	539.6763	548.4876	558.0078	563.4083	567.0299	569.6844
0.6	667.1084	677.8641	688.9576	700.9445	707.7448	712.3052	715.6479
0.7	816.3993	829.5953	843.2069	857.9158	866.2609	871.8576	875.9600
0.8	981.0616	996.9634	1013.3673	1031.0955	1041.1543	1047.9006	1052.8458
0.9	1163.5984	1182.5169	1202.0348	1223.1305	1235.1011	1243.1300	1249.0156

5.2.2 Concentración de xilosa

Para el caso de la xilosa, la tendencia es la misma que con la glucosa, al aumentar la velocidad de dilución disminuye la concentración de xilosa, y al aumentar la x_3 aumenta la concentración de xilosa.

La mayor concentración de xilosa se obtiene a partir del BCA, esto ocurre por las concentraciones de agua que se tienen en el caldo de azúcares reductores.

Tabla 5.3 Concentración de xilosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	14.1352	16.3933	14.9149	12.9592	11.7082	10.8164	10.1369
0.2	29.3813	34.0737	31.0017	26.9375	24.3377	22.4843	21.0721
0.3	45.8749	53.1990	48.4041	42.0602	38.0017	35.1084	32.9037
0.4	63.7753	73.9538	67.2903	58.4736	52.8328	48.8112	45.7467
0.5	83.2708	96.5556	87.8587	76.3505	68.9872	63.7372	59.7366
0.6	104.5844	121.2626	110.3445	95.8957	86.6502	80.0579	75.0341
0.7	127.9829	148.3831	135.0287	117.3542	106.0435	97.9782	91.8317
0.8	153.7880	178.2890	162.2505	141.0213	127.4345	117.7454	110.3612
0.9	182.3910	211.4327	192.4224	167.2566	151.1486	139.6607	130.9051

Evaporación

Tabla 5.4 Concentración de xilosa (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	12.3946	10.9579	9.4765	7.8764	6.9688	6.3603	5.9143
0.2	25.7642	22.7784	19.6995	16.3737	14.4873	13.2224	12.2954
0.3	40.2286	35.5675	30.7609	25.5684	22.6231	20.6482	19.2007
0.4	55.9280	49.4493	42.7681	35.5499	31.4555	28.7099	26.6975
0.5	73.0276	64.5703	55.8480	46.4240	41.0780	37.4930	34.8653
0.6	91.7235	81.1039	70.1509	58.3157	51.6016	47.0989	43.7985
0.7	112.2501	99.2580	85.8568	71.3751	63.1589	57.6487	53.6097
0.8	134.8902	119.2830	103.1828	85.7829	75.9104	69.2890	64.4354
0.9	159.9879	141.4838	122.3933	101.7595	90.0510	82.1979	76.4412

5.2.3 Concentración de agua

Para el caso de concentración de agua, con el aumento de x_3 esta disminuye, por lo que la relación entre estas es inversamente proporcional. Por otro lado, al aumentar la velocidad de dilución también aumenta la concentración de agua, aunque esto podría considerarse despreciable ya que varía únicamente por decimas de gramo, en este caso la relación es directamente proporcional. La concentración de agua final es significativamente menor para el BCA con respecto al PCA.

Tabla 5.5 Concentración de agua (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	922.8423	922.8072	922.8302	922.8606	922.8801	922.8940	922.9046
0.2	852.5418	852.4743	852.5185	852.5769	852.6144	852.6410	852.6613
0.3	776.4897	776.3936	776.4565	776.5397	776.5929	776.6308	776.6597
0.4	693.9500	693.8307	693.9088	694.0121	694.0782	694.1254	694.1613
0.5	604.0557	603.9202	604.0089	604.1264	604.2015	604.2551	604.2959
0.6	505.7780	505.6355	505.7288	505.8523	505.9313	505.9877	506.0306
0.7	397.8868	397.7496	397.8394	397.9583	398.0343	398.0886	398.1299
0.8	278.8988	278.7833	278.8589	278.9590	279.0231	279.0688	279.1037
0.9	147.0094	146.9372	146.9845	147.0471	147.0871	147.1157	147.1375

Evaporación

Tabla 5.6 Concentración de agua (g/L) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	922.8694	922.8918	922.9149	922.9398	922.9539	922.9634	922.9703
0.2	852.5938	852.6368	852.6811	852.7289	852.7561	852.7743	852.7876
0.3	776.5637	776.6248	776.6878	776.7559	776.7945	776.8204	776.8393
0.4	694.0420	694.1179	694.1962	694.2808	694.3288	694.3609	694.3845
0.5	604.1603	604.2466	604.3356	604.4317	604.4863	604.5229	604.5497
0.6	505.8880	505.9787	506.0723	506.1735	506.2309	506.2694	506.2976
0.7	397.9926	398.0800	398.1701	398.2675	398.3228	398.3599	398.3870
0.8	278.9880	279.0616	279.1375	279.2196	279.2662	279.2974	279.3203
0.9	147.0652	147.1112	147.1587	147.2100	147.2391	147.2587	147.2730

5.2.4 Vapor alimentado

En lo que concierne al vapor alimentado, es obvio que al aumentar el valor de x_3 se requiere una mayor cantidad de vapor, por lo que la relación entre estos es directamente proporcional. En cuanto a la velocidad de dilución, si la evaporación se realizara en lote, se requeriría una elevada cantidad de vapor con respecto a la operación en continuo, esto por la diferencia de flujos, por lo que al operar en continuo la cantidad de vapor sería menor pero esta se iría incrementando con el aumento de la velocidad de dilución ya que se estarían manejando flujos más grandes. Se requiere un mayor suministro de vapor para concentrar azúcares reductores provenientes del BCA, variando de un 5 a 6% más de vapor con respecto al caldo de azúcares reductores provenientes del PCA.

Tabla 5.7 Vapor alimentado (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	3230.0902	464.4735	943.5287	1909.3774	2879.5159	3851.8473	4824.8065
0.2	4183.9561	479.7154	965.7390	1941.1512	2918.4211	3896.6425	4874.7065
0.3	4504.0990	485.0100	973.5700	1952.5968	2932.6705	3913.2818	4893.4736
0.4	4666.3240	487.8714	977.9135	1959.1756	2941.0790	3923.3131	4904.9963
0.5	4765.7632	489.8019	980.9473	1963.9788	2947.4084	3931.0446	4914.0508
0.6	4834.0821	491.3015	983.3962	1968.0352	2952.9106	3937.9099	4922.2262
0.7	4884.7665	492.5832	985.5687	1971.7828	2958.1184	3944.5192	4930.1991
0.8	4924.3675	493.7502	987.6146	1975.4342	2963.2905	3951.1688	4938.2977
0.9	4955.9567	494.8511	989.6041	1979.0890	2968.5480	3957.9972	4946.6757

Evaporación

Tabla 5.8 Vapor alimentado (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	3527.9904	441.0308	892.2850	1800.1071	2710.9018	3623.2229	4536.5122
0.2	4134.0899	451.6487	907.7280	1822.1891	2737.9384	3654.3491	4571.1793
0.3	4338.1556	455.3881	913.2754	1830.3488	2748.1487	3666.3216	4584.7311
0.4	4442.2000	457.4581	916.4496	1835.2295	2754.4551	3673.9094	4593.5089
0.5	4506.6081	458.9002	918.7546	1838.9592	2759.4410	3680.0652	4600.7796
0.6	4551.4797	460.0611	920.6910	1842.2461	2763.9664	3685.7714	4607.6302
0.7	4585.3749	461.0883	922.4717	1845.3916	2768.3970	3691.4463	4614.5233
0.8	4612.4525	462.0536	924.2004	1848.5421	2772.9105	3697.2927	4621.6835
0.9	4634.6628	462.9904	925.9254	1851.7660	2777.5901	3703.4056	4629.2156

5.2.5 Vapor efecto 1, 2 y 3

El vapor que sale del primer efecto para alimentar el segundo efecto presenta la misma tendencia que el vapor alimentado ya que el aumentar x_3 , V_1 también aumenta. En cuanto a la velocidad de dilución el comportamiento es el mismo que el del vapor alimentado.

En este caso, también es mayor la cantidad de V_1 requerido para la concentración de azúcares reductores provenientes de BCA, lo cual es obvio ya que la cantidad de vapor alimentado desde el inicio es mayor para el BCA en comparación con el PCA.

Este mismo comportamiento se repite para V_2 y V_3 , en las Tablas 5.9-5.14 se muestran los valores de V_1 , V_2 y V_3 , de lo que se puede observar que $V_1 < V_2 < V_3$.

Tabla 5.9 Vapor efecto 1 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	3424.8610	323.6362	662.5197	1348.3687	2038.7030	2731.3290	3424.8610
0.2	3474.0148	338.8856	684.6789	1379.9390	2077.2325	2775.5663	3474.0148
0.3	3491.3892	344.0676	692.2632	1390.8583	2090.6696	2791.1041	3491.3892
0.4	3501.0680	346.7573	696.2530	1396.7140	2097.9827	2799.6660	3501.0680
0.5	3507.8661	348.4691	698.8438	1400.6226	2102.9642	2805.5955	3507.8661
0.6	3513.3862	349.7071	700.7663	1403.6214	2106.8765	2810.3381	3513.3862
0.7	3518.3108	350.6861	702.3317	1406.1521	2110.2570	2814.5095	3518.3108
0.8	3522.9712	351.5103	703.6911	1408.4291	2113.3667	2818.4085	3522.9712
0.9	3527.5226	352.2284	704.9152	1410.5531	2116.3279	2822.1752	3527.5226

Evaporación

Tabla 5.10 Vapor efecto 1 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0.0001	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	3227.3390	309.5416	629.7694	1275.7801	1924.8984	2575.6126	3227.3390
0.2	3261.2108	320.1374	645.1218	1297.6102	1951.5081	2606.1299	3261.2108
0.3	3273.4279	323.7620	650.4245	1305.2574	1960.9339	2617.0435	3273.4279
0.4	3280.4650	325.6667	653.2612	1309.4521	1966.2036	2623.2430	3280.4650
0.5	3285.6159	326.9017	655.1480	1312.3395	1969.9220	2627.7052	3285.6159
0.6	3289.9768	327.8164	656.5897	1314.6337	1972.9560	2631.4211	3289.9768
0.7	3294.0145	328.5597	657.8013	1316.6389	1975.6747	2634.8124	3294.0145
0.8	3297.9558	329.2037	658.8870	1318.5026	1978.2575	2638.0840	3297.9558
0.9	3301.9067	329.7826	659.8958	1320.2941	1980.7884	2641.3320	3301.9067

Tabla 5.11 Vapor efecto 2 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	2145.0396	349.6691	713.2766	1447.8834	2186.5909	2927.3939	3668.9423
0.2	3033.7892	363.6920	733.5959	1476.7114	2221.6559	2967.5366	3713.4298
0.3	3329.7612	368.3502	740.3380	1486.2601	2233.2545	2980.7987	3728.1111
0.4	3477.4642	370.6629	743.6774	1490.9731	2238.9629	2987.3096	3735.3025
0.5	3565.7692	372.0336	745.6485	1493.7382	2242.2955	2991.0941	3739.4660
0.6	3624.2562	372.9292	746.9285	1495.5166	2244.4221	2993.4921	3742.0870
0.7	3665.5223	373.5488	747.8058	1496.7179	2245.8409	2995.0742	3743.7980
0.8	3695.6853	373.9890	748.4205	1497.5409	2246.7941	2996.1176	3744.9065
0.9	3717.6082	374.2950	748.8380	1498.0787	2247.3950	2996.7523	3745.5566

Tabla 5.12 Vapor efecto 2 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0.0001	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	2490.1556	333.3244	676.4191	1367.6875	2061.7972	2757.3660	3453.8601
0.2	3054.2146	343.0427	690.4457	1387.5186	2085.8596	2784.8517	3484.2569
0.3	3242.0201	346.2675	695.0929	1394.0733	2093.7975	2793.9038	3494.2523
0.4	3335.7026	347.8652	697.3877	1397.2943	2097.6829	2798.3190	3499.1121
0.5	3391.6692	348.8085	698.7351	1399.1697	2099.9293	2800.8560	3501.8885
0.6	3428.6954	349.4215	699.6030	1400.3612	2101.3404	2802.4331	3503.5978
0.7	3454.7769	349.8419	700.1904	1401.1507	2102.2583	2803.4415	3504.6727
0.8	3473.7976	350.1369	700.5942	1401.6753	2102.8494	2804.0714	3505.3237
0.9	3487.5758	350.3378	700.8597	1401.9991	2103.1918	2804.4119	3505.6494

Evaporación

Tabla 5.13 Vapor efecto 3 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	2621.6466	367.3365	745.5051	1507.5906	2272.8622	3039.7626	3807.0947
0.2	3333.3619	378.4989	761.6385	1530.3940	2300.5159	3071.3379	3842.0045
0.3	3569.9290	382.1369	766.8494	1537.6597	2309.2296	3081.1898	3852.7990
0.4	3687.5585	383.8737	769.2889	1540.9580	2313.0828	3085.4428	3857.3541
0.5	3757.5595	384.8348	770.5881	1542.6045	2314.8935	3087.3243	3859.2475
0.6	3803.7927	385.3967	771.2931	1543.3740	2315.6045	3087.9140	3859.6766
0.7	3836.6502	385.7236	771.6415	1543.6040	2315.6265	3087.6822	3859.1624
0.8	3861.7027	385.9033	771.7607	1543.4755	2315.1796	3086.8811	3857.9847
0.9	3883.1542	386.0024	771.7472	1543.1249	2314.4299	3085.7007	3856.3540

Tabla 5.14 Vapor efecto 3 (kg/h) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	2829.1032	348.4882	704.5708	1420.6827	2139.0024	2858.4558	3578.6283
0.2	3280.5318	356.2059	715.6714	1436.2965	2157.8692	2879.9284	3602.2963
0.3	3430.3110	358.7004	719.2148	1441.1863	2163.6851	2886.4546	3609.3959
0.4	3504.5231	359.8699	720.8299	1443.3165	2166.1198	2889.0859	3612.1551
0.5	3548.4242	360.4947	721.6436	1444.2812	2167.1089	2890.0342	3613.0215
0.6	3577.1562	360.8359	722.0326	1444.6137	2167.2998	2890.0397	3612.8137
0.7	3597.3133	361.0070	722.1613	1444.5464	2166.9745	2889.4245	3611.8885
0.8	3612.4296	361.0691	722.1175	1444.2037	2166.2841	2888.3614	3610.4369
0.9	3625.1710	361.0680	721.9676	1443.6793	2165.3424	2886.9806	3608.6029

5.2.6 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1, 2 y 3

Para el caso de la velocidad de transferencia de calor, se tiene la misma tendencia que con los vapores intermedios V_1 , V_2 y V_3 con respecto al aumento de x_3 y las velocidades de dilución. Por lo tanto, también se requiere un mayor suministro de carga térmica para el BCA con respecto al PCA.

La velocidad de transferencia de calor es mayor en el primer efecto de la evaporación si se compara con el segundo efecto, por lo que es en el primer efecto donde se lleva a cabo la mayor evaporación de agua.

Evaporación

La velocidad de transferencia de calor en el tercer efecto es mayor que la del segundo efecto, ya que en el tercer efecto se terminan de concentrar los azúcares reductores, por lo que la relación entre las velocidades de transferencia de calor entre los efectos es $q_1 > q_2 < q_3$, donde $q_1 > q_3$.

Tabla 5.15 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	7.195*10 ⁶	1.035*10 ⁶	2.102*10 ⁶	4.253*10 ⁶	6.414*10 ⁶	8.579*10 ⁶	1.075*10 ⁷
0.2	9.319*10 ⁶	1.068*10 ⁶	2.151*10 ⁶	4.324*10 ⁶	6.500*10 ⁶	8.679*10 ⁶	1.086*10 ⁷
0.3	1.003*10 ⁷	1.080*10 ⁶	2.168*10 ⁶	4.349*10 ⁶	6.532*10 ⁶	8.716*10 ⁶	1.090*10 ⁷
0.4	1.039*10 ⁷	1.087*10 ⁶	2.178*10 ⁶	4.364*10 ⁶	6.551*10 ⁶	8.739*10 ⁶	1.093*10 ⁷
0.5	1.062*10 ⁷	1.091*10 ⁶	2.185*10 ⁶	4.374*10 ⁶	6.565*10 ⁶	8.756*10 ⁶	1.095*10 ⁷
0.6	1.077*10 ⁷	1.094*10 ⁶	2.190*10 ⁶	4.384*10 ⁶	6.577*10 ⁶	8.771*10 ⁶	1.096*10 ⁷
0.7	1.088*10 ⁷	1.097*10 ⁶	2.195*10 ⁶	4.392*10 ⁶	6.589*10 ⁶	8.786*10 ⁶	1.098*10 ⁷
0.8	1.097*10 ⁷	1.100*10 ⁶	2.200*10 ⁶	4.400*10 ⁶	6.600*10 ⁶	8.801*10 ⁶	1.100*10 ⁷
0.9	1.104*10 ⁷	1.102*10 ⁶	2.204*10 ⁶	4.408*10 ⁶	6.612*10 ⁶	8.816*10 ⁶	1.102*10 ⁷

Tabla 5.16 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	7.858*10 ⁶	9.823*10 ⁵	1.987*10 ⁶	4.009*10 ⁶	6.038*10 ⁶	8.070*10 ⁶	1.010*10 ⁷
0.2	9.208*10 ⁶	1.006*10 ⁶	2.022*10 ⁶	4.059*10 ⁶	6.098*10 ⁶	8.140*10 ⁶	1.018*10 ⁷
0.3	9.663*10 ⁶	1.014*10 ⁶	2.034*10 ⁶	4.077*10 ⁶	6.121*10 ⁶	8.166*10 ⁶	1.021*10 ⁷
0.4	9.894*10 ⁶	1.019*10 ⁶	2.041*10 ⁶	4.088*10 ⁶	6.135*10 ⁶	8.183*10 ⁶	1.023*10 ⁷
0.5	1.004*10 ⁷	1.022*10 ⁶	2.046*10 ⁶	4.096*10 ⁶	6.146*10 ⁶	8.197*10 ⁶	1.025*10 ⁷
0.6	1.014*10 ⁷	1.025*10 ⁶	2.051*10 ⁶	4.103*10 ⁶	6.156*10 ⁶	8.210*10 ⁶	1.026*10 ⁷
0.7	1.021*10 ⁷	1.027*10 ⁶	2.055*10 ⁶	4.110*10 ⁶	6.166*10 ⁶	8.222*10 ⁶	1.028*10 ⁷
0.8	1.027*10 ⁷	1.029*10 ⁶	2.059*10 ⁶	4.117*10 ⁶	6.176*10 ⁶	8.235*10 ⁶	1.029*10 ⁷
0.9	1.032*10 ⁷	1.031*10 ⁶	2.062*10 ⁶	4.125*10 ⁶	6.187*10 ⁶	8.249*10 ⁶	1.031*10 ⁷

Tabla 5.17 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	3.881*10 ⁶	7.144*10 ⁵	1.462*10 ⁶	2.976*10 ⁶	4.500*10 ⁶	6.029*10 ⁶	7.559*10 ⁶
0.2	6.000*10 ⁶	7.479*10 ⁵	1.511*10 ⁶	3.046*10 ⁶	4.585*10 ⁶	6.126*10 ⁶	7.667*10 ⁶

Evaporación

0.3	6.708*10 ⁶	7.593*10 ⁵	1.528*10 ⁶	3.069*10 ⁶	4.614*10 ⁶	6.159*10 ⁶	7.705*10 ⁶
0.4	7.064E+06	7.651*10 ⁵	1.536*10 ⁶	3.082*10 ⁶	4.629*10 ⁶	6.177*10 ⁶	7.725*10 ⁶
0.5	7.278E+06	7.688*10 ⁵	1.542*10 ⁶	3.090*10 ⁶	4.639*10 ⁶	6.189*10 ⁶	7.739*10 ⁶
0.6	7.422E+06	7.713*10 ⁵	1.546*10 ⁶	3.096*10 ⁶	4.647*10 ⁶	6.199*10 ⁶	7.749*10 ⁶
0.7	7.526E+06	7.733*10 ⁵	1.549*10 ⁶	3.101*10 ⁶	4.653*10 ⁶	6.206*10 ⁶	7.758*10 ⁶
0.8	7.604E+06	7.749*10 ⁵	1.551*10 ⁶	3.105*10 ⁶	4.659*10 ⁶	6.213*10 ⁶	7.767*10 ⁶
0.9	7.663E+06	7.763*10 ⁵	1.554*10 ⁶	3.109*10 ⁶	4.664*10 ⁶	6.220*10 ⁶	7.774*10 ⁶

Tabla 5.18 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	4.797*10 ⁶	6.832*10 ⁵	1.390*10 ⁶	2.816*10 ⁶	4.249*10 ⁶	5.685*10 ⁶	7.123*10 ⁶
0.2	6.143*10 ⁶	7.066*10 ⁵	1.424*10 ⁶	2.864*10 ⁶	4.307*10 ⁶	5.752*10 ⁶	7.198*10 ⁶
0.3	6.593*10 ⁶	7.145*10 ⁵	1.435*10 ⁶	2.880*10 ⁶	4.327*10 ⁶	5.775*10 ⁶	7.224*10 ⁶
0.4	6.819*10 ⁶	7.186*10 ⁵	1.441*10 ⁶	2.889*10 ⁶	4.338*10 ⁶	5.788*10 ⁶	7.238*10 ⁶
0.5	6.956*10 ⁶	7.212*10 ⁵	1.445*10 ⁶	2.895*10 ⁶	4.346*10 ⁶	5.797*10 ⁶	7.248*10 ⁶
0.6	7.049*10 ⁶	7.231*10 ⁵	1.448*10 ⁶	2.900*10 ⁶	4.352*10 ⁶	5.804*10 ⁶	7.256*10 ⁶
0.7	7.116*10 ⁶	7.245*10 ⁵	1.451*10 ⁶	2.903*10 ⁶	4.357*10 ⁶	5.810*10 ⁶	7.264*10 ⁶
0.8	7.167*10 ⁶	7.258*10 ⁵	1.453*10 ⁶	2.907*10 ⁶	4.361*10 ⁶	5.816*10 ⁶	7.270*10 ⁶
0.9	7.206*10 ⁶	7.268*10 ⁵	1.454*10 ⁶	2.910*10 ⁶	4.365*10 ⁶	5.821*10 ⁶	7.277*10 ⁶

Tabla 5.19 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	4.875*10 ⁶	7.945*10 ⁵	1.621*10 ⁶	3.290*10 ⁶	4.968*10 ⁶	6.651*10 ⁶	8.336*10 ⁶
0.2	6.894*10 ⁶	8.262*10 ⁵	1.666*10 ⁶	3.354*10 ⁶	5.047*10 ⁶	6.741*10 ⁶	8.435*10 ⁶
0.3	7.564*10 ⁶	8.365*10 ⁵	1.681*10 ⁶	3.375*10 ⁶	5.072*10 ⁶	6.769*10 ⁶	8.466*10 ⁶
0.4	7.898*10 ⁶	8.415*10 ⁵	1.688*10 ⁶	3.385*10 ⁶	5.083*10 ⁶	6.782*10 ⁶	8.480*10 ⁶
0.5	8.095*10 ⁶	8.443*10 ⁵	1.692*10 ⁶	3.390*10 ⁶	5.088*10 ⁶	6.787*10 ⁶	8.486*10 ⁶
0.6	8.224*10 ⁶	8.459*10 ⁵	1.694*10 ⁶	3.392*10 ⁶	5.091*10 ⁶	6.790*10 ⁶	8.487*10 ⁶
0.7	8.313*10 ⁶	8.468*10 ⁵	1.695*10 ⁶	3.393*10 ⁶	5.091*10 ⁶	6.789*10 ⁶	8.487*10 ⁶
0.8	8.376*10 ⁶	8.473*10 ⁵	1.696*10 ⁶	3.393*10 ⁶	5.090*10 ⁶	6.788*10 ⁶	8.484*10 ⁶
0.9	8.420*10 ⁶	8.474*10 ⁵	1.695*10 ⁶	3.392*10 ⁶	5.088*10 ⁶	6.784*10 ⁶	8.480*10 ⁶

Evaporación

Tabla 5.20 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 (W) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	5.659*10 ⁶	7.573*10 ⁵	1.537*10 ⁶	3.107*10 ⁶	4.684*10 ⁶	6.265*10 ⁶	7.847*10 ⁶
0.2	6.939*10 ⁶	7.792*10 ⁵	1.568*10 ⁶	3.152*10 ⁶	4.738*10 ⁶	6.326*10 ⁶	7.914*10 ⁶
0.3	7.364*10 ⁶	7.864*10 ⁵	1.579*10 ⁶	3.166*10 ⁶	4.755*10 ⁶	6.345*10 ⁶	7.935*10 ⁶
0.4	7.575*10 ⁶	7.897*10 ⁵	1.583*10 ⁶	3.172*10 ⁶	4.762*10 ⁶	6.352*10 ⁶	7.943*10 ⁶
0.5	7.698*10 ⁶	7.915*10 ⁵	1.586*10 ⁶	3.175*10 ⁶	4.765*10 ⁶	6.356*10 ⁶	7.946*10 ⁶
0.6	7.779*10 ⁶	7.925*10 ⁵	1.587*10 ⁶	3.176*10 ⁶	4.766*10 ⁶	6.356*10 ⁶	7.946*10 ⁶
0.7	7.834*10 ⁶	7.931*10 ⁵	1.587*10 ⁶	3.176*10 ⁶	4.766*10 ⁶	6.355*10 ⁶	7.945*10 ⁶
0.8	7.872*10 ⁶	7.932*10 ⁵	1.587*10 ⁶	3.175*10 ⁶	4.764*10 ⁶	6.352*10 ⁶	7.941*10 ⁶
0.9	7.898*10 ⁶	7.932*10 ⁵	1.587*10 ⁶	3.174*10 ⁶	4.761*10 ⁶	6.349*10 ⁶	7.936*10 ⁶

5.2.7 Área de efecto 1, 2 y 3

Para el caso de las áreas, se tiene el mismo comportamiento que en el caso de las velocidades de transferencia de calor, al aumentar x_3 y la velocidad de dilución también se tiene un aumento en el tamaño de las áreas.

El tamaño de las áreas es mayor en el primer efecto en comparación con el segundo efecto, esto está relacionado directamente con la velocidad de transferencia de calor, ya que al ser en el primer efecto donde se tiene la más alta transferencia, coincide con que se requiera la mayor área de transferencia de calor.

Por lo tanto, la relación de las áreas de transferencia de calor coincide con la relación entre las velocidades de transferencia de calor entre los efectos es $A_1 > A_2 < A_3$, donde $A_1 > A_3$.

Tabla 5.21 Área de efecto 1 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	150.6687	21.6121	43.8953	88.8170	133.9358	179.1552	224.4030
0.2	196.2113	22.4224	45.1312	90.7013	136.3556	182.0531	227.7424
0.3	212.6016	22.8075	45.7731	91.7891	137.8517	183.9382	230.0042
0.4	222.0112	23.1180	46.3295	92.8037	139.3055	185.8217	232.3109
0.5	228.9003	23.4254	46.9054	93.8960	140.9030	187.9184	234.9029
0.6	234.7739	23.7553	47.5391	95.1233	142.7162	190.3137	237.8773
0.7	240.2932	24.1205	48.2506	96.5174	144.7873	193.0589	241.2943
0.8	245.8002	24.5294	49.0539	98.1020	147.1490	196.1957	245.2042
0.9	251.4786	24.9882	49.9606	99.8986	149.8323	199.7640	249.6558

Evaporación

Tabla 5.22 Área de efecto 1 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	164.4342	20.5181	41.5063	83.7268	126.0838	168.5108	210.9824
0.2	193.6432	21.1068	42.4147	85.1348	127.9133	170.7218	213.5493
0.3	204.4806	21.4106	42.9325	86.0341	129.1681	172.3186	215.4797
0.4	211.0191	21.6727	43.4117	86.9241	130.4557	173.9972	217.5450
0.5	216.0923	21.9432	43.9255	87.9103	131.9065	175.9085	219.9143
0.6	220.6609	22.2404	44.5015	89.0345	133.5736	178.1157	222.6599
0.7	225.1521	22.5738	45.1550	90.3214	135.4900	180.6598	225.8302
0.8	229.7930	22.9500	45.8974	91.7909	137.6837	183.5762	229.4684
0.9	234.7127	23.3746	46.7387	93.4619	140.1821	186.9007	233.6185

Tabla 5.23 Área de efecto 2 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	81.2762	14.9231	30.5439	62.1546	93.9702	125.8905	157.8519
0.2	126.3367	15.6957	31.7051	63.8906	96.1684	128.4933	160.8229
0.3	142.1623	16.0306	32.2470	64.7790	97.3658	129.9805	162.5877
0.4	150.8836	16.2774	32.6767	65.5405	98.4403	131.3585	164.2629
0.5	156.9450	16.5071	33.0975	66.3234	99.5739	132.8372	166.0827
0.6	161.8396	16.7444	33.5463	67.1817	100.8342	134.4955	168.1364
0.7	166.2166	17.0011	34.0413	68.1435	102.2574	136.3774	170.4749
0.8	170.4051	17.2844	34.5941	69.2281	103.8698	138.5154	173.1369
0.9	174.5740	17.5994	35.2136	70.4514	105.6937	140.9385	176.1576

Tabla 5.24 Área de efecto 2 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x_3/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	100.3887	14.2708	29.0304	58.8032	88.7179	118.7055	148.7393
0.2	129.1881	14.8246	29.8693	60.0730	90.3406	120.6411	150.9623
0.3	139.5230	15.0817	30.2939	60.7862	91.3164	121.8661	152.4281
0.4	145.4389	15.2844	30.6546	61.4396	92.2495	123.0722	153.9030
0.5	149.7579	15.4824	31.0236	62.1366	93.2667	124.4056	155.5502
0.6	153.4309	15.6931	31.4269	62.9159	94.4169	125.9239	157.4348
0.7	156.8752	15.9252	31.8782	63.7989	95.7277	127.6608	159.5965
0.8	160.3064	16.1842	32.3866	64.8011	97.2208	129.6434	162.0677
0.9	163.8399	16.4743	32.9596	65.9361	98.9158	131.8972	164.8796

Evaporación

Tabla 5.25 Área de efecto 3 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de BCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x₃/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	102.0857	16.5968	33.8488	68.6998	103.7431	138.8848	174.0611
0.2	145.1423	17.3370	34.9630	70.3687	105.8593	141.3934	176.9274
0.3	160.3043	17.6610	35.4888	71.2337	107.0277	142.8470	178.6544
0.4	168.6942	17.9020	35.9097	71.9823	108.0861	144.2060	180.3081
0.5	174.5560	18.1279	36.3248	72.7564	109.2084	145.6710	182.1121
0.6	179.3165	18.3625	36.7693	73.6077	110.4594	147.3180	184.1525
0.7	183.5968	18.6170	37.2606	74.5634	111.8744	149.1895	186.4786
0.8	187.7126	18.8983	37.8102	75.6424	113.4788	151.3175	189.1284
0.9	191.8261	19.2115	38.4266	76.8601	115.2949	153.7305	192.1370

Tabla 5.26 Área de efecto 3 (m²) de una corriente proveniente de un hidrolizado de PCA filtrado a 5 FPU y 5% p/v.

x₃/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
0.1	118.4089	15.8182	32.0955	64.8883	97.8145	130.8091	163.8471
0.2	145.9314	16.3495	32.9018	66.1117	99.3805	132.6795	165.9977
0.3	155.8409	16.5989	33.3150	66.8083	100.3358	133.8807	167.4368
0.4	161.5428	16.7975	33.6695	67.4524	101.2571	135.0728	168.8957
0.5	165.7316	16.9927	34.0343	68.1428	102.2657	136.3958	170.5306
0.6	169.3162	17.2013	34.4343	68.9167	103.4085	137.9049	172.4044
0.7	172.6958	17.4317	34.8826	69.7947	104.7125	139.6332	174.5557
0.8	176.0772	17.6891	35.3883	70.7921	106.1989	141.6072	177.0165
0.9	179.5718	17.9778	35.9588	71.9224	107.8870	143.8522	179.8176

Como se vio en pudo observar en los resultados anteriormente mostrados, no existen puntos mínimos o máximos, ya que el comportamiento de los valores de todas las variables es siempre creciente conforme aumenta el valor de x_3 y la velocidad de dilución, por lo que no existen puntos críticos, y tal como se mencionó en la sub sección 5.2.1, para fines de operación en la etapa de fermentación, no es conveniente trabajar con concentraciones mayores de 219 g/L de glucosa, y por ende no es recomendable operar con valores mayores de 0.3 para x_3 , por lo que en la siguiente sección se fijaron los valores que se desean obtener para la concentración de glucosa tomando como base el estudio realizado en Peñaloza (2014).

5.3 Diseño

Se tomó como caso de estudio cada una de las corrientes de salida de la hidrólisis enzimática de cada uno de los reactores, a las diferentes velocidades de dilución ($D=0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$) cargas de complejo enzimático (5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU) y cargas de sólidos (5, 10, 15 y 20% p/v), por lo que se tienen 980 corrientes que después fueron filtradas, donde se supone que las corrientes de alimentación contienen únicamente glucosa, xilosa y agua.

El sistema de evaporación de efecto triple puede visualizarse como un sistema con una $F, x_F, x_{FG}, x_{FX}, x_{FA}, T_F, U_1, U_2, U_3$ conocidas, de los resultados observados en la sección anterior se observó que es conveniente trabajar en un intervalo de x_3 menor a 0.3, por lo que en esta sección se buscarán las x_3 que satisfagan las concentraciones de glucosa que se pueden alimentar a un reactor en batch y un tren de cinco reactores en operación en continuo para llevar a cabo la fermentación, dichas concentraciones fueron obtenidas tomando como base el estudio realizado previamente en Peñaloza (2014), donde mediante un programa creado en un software comercial se realizaron diversas corridas en diferentes campos de acción, con las que se obtuvieron superficies de respuesta de las concentraciones de glucosa para un reactor con respecto al espacio de valores que pueden tomar las condiciones de operación.

Esto se verá más a fondo en el capítulo 6, donde se obtuvieron las concentraciones de glucosa que deben ser alimentadas a un reactor en batch, así como a un tren de cinco reactores en operación en continuo para las velocidades de dilución 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1, a tres diferentes concentraciones de levadura C^* (punto crítico), 25 y 30 g/L.

Por lo tanto, cada corriente que viene de un reactor de hidrólisis enzimática a una velocidad de dilución específica, una determinada concentración de complejo enzimático y una determinada carga de sólidos, que fue filtrada será alimentadas al evaporador para satisfacer una concentración final de glucosa en la corriente de salida en un reactor y velocidad de dilución determinados. En el siguiente diagrama se esquematizan los escenarios que se trabajaron en el diseño de la etapa de evaporación, si se tomará la carga de 5% p/v original antes de iniciar la hidrólisis enzimática, se tendrá un caldo de hidrolizado que fue obtenido a partir de concentraciones de complejo enzimático que van de 5-60 FPU, y por cada concentración de complejo enzimático se operó a velocidades de dilución que van de 0-1 1/h, teniendo hasta aquí un total de 49 escenarios de operación en la etapa de sacarificación, después la corriente de salida de cada uno de estos escenarios pasa por una etapa de filtración para separar los sólidos no convertidos, separándose los sólidos del caldo de hidrolizado y suponiendo que los azúcares reductores glucosa y xilosa se encuentran disueltos completamente en el agua alimentada al inicio de la hidrólisis enzimática.

Evaporación

Después cada una de estas corrientes ya filtradas pasa a la etapa de evaporación para obtener la concentración de glucosa necesaria para llevar a cabo la fermentación a la misma velocidad de dilución que la antecede, pero para el caso de tener un reactor de operación en continuo, un tren de dos, tres, cuatro y cinco reactores de operación en continuo, tal y como se muestra en la Tabla 5.27, teniendo ahora 245 escenarios de cálculo, estos mismos escenarios se calculan para el caso de cargas de 10, 15 y 20% p/v.

Tabla 5.27 Concentraciones de glucosa deseadas para obtener en la corriente líquida al final de la evaporación.

R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	219.7269	126.6092	106.5998	85.3360	72.8240	64.1420	57.6180
2	219.7270	172.3435	155.8479	136.1704	123.2827	113.6215	105.8944
3	219.7268	189.6480	176.1558	159.1903	147.5373	138.5007	131.0756
4	219.7270	201.4640	192.0001	177.1645	167.3540	159.5397	152.9759
5	219.7270	209.0847	202.0000	190.0000	179.6559	172.5691	166.5262

Por lo tanto, se tiene un total de 980 escenarios y es necesario calcular el valor de x_3 para cada uno de ellos, cabe señalar que los valores de concentraciones de glucosa presentados en la Tabla 5.27 son para cuando se tiene un valor C^* en la corriente de salida, pero además de este se tienen otros dos valores de C (los cuales serán abordados en el capítulo 6), por lo que se tienen realmente tres concentraciones de glucosa para determinada C para cada una de las combinaciones ya mencionadas, teniendo un total de 2940 escenarios de operación para efectuar la evaporación, y por ende, se calcularon 2940 valores de x_3 .

Para fines de prácticos, en este apartado se mostrarán únicamente los resultados para cuando se quiere obtener un valor de concentración de glucosa con C^* .

De los resultados obtenidos en la simulación, se pudo observar que las tendencias para los vapores entre los efectos, las velocidades de transferencia de calor y las áreas son las mismas entre ellos, por lo que solamente se discutirán el comportamiento de estos en el primer efecto para las diferentes cargas de sólidos y número de reactores, los resultados del segundo y tercer efecto los podrá encontrar en el apéndice A.

5.3.1 Concentración de glucosa

En las Figuras 5.3 y 5.4 se muestran los resultados de las concentraciones de glucosa obtenidos a partir de BCA y PCA en la corriente líquida que sale del último efecto de la evaporación, esto para cada uno de los 980 escenarios anteriormente mencionados. En cada una de las 20 gráficas mostradas por figura, se tienen siete superficies correspondientes a los valores de

Evaporación

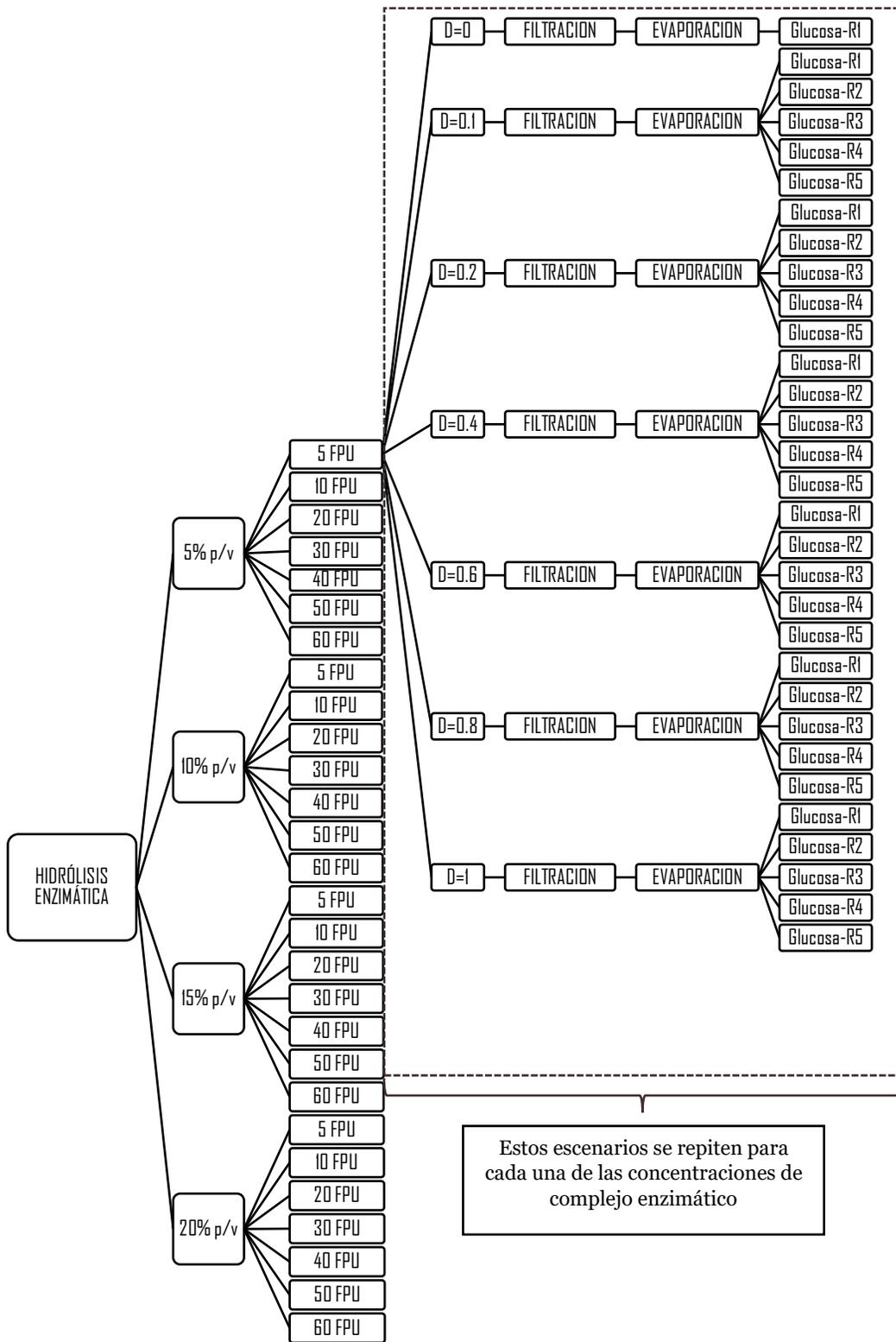


Figura 5.2 Representación de los escenarios de cálculo aplicados en la etapa de evaporación

Evaporación

concentración de glucosa a partir de sacarificaciones efectuadas con 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU de complejo enzimático, estas no se pueden distinguir y se ven como una sola superficie, ya que al haber sido fijados con los valores de la Tabla 5.27, se tienen los mismos valores para las siete superficies. Es por ello que, no existe diferencia en cada una de las gráficas representadas en estas figuras, por lo que tampoco existe una diferencia en cuanto a las biomásas empleadas, ni con respecto a los hidrolizados que provienen de uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores de hidrólisis enzimática que se muestran en cada fila.

Por otro lado, se puede observar que la mayor concentración de glucosa es obtenida en la operación en lote cuando se tiene una velocidad de dilución igual a 0, pero al aumentar la cantidad de reactores de operación en continuo y operando a bajas velocidades de dilución las concentraciones de glucosa se acercan bastante a la concentración de la operación en lote.

5.3.2 Concentración de agua

En las Figuras 5.5 y 5.6 se muestran los resultados de los valores de la concentración de agua obtenidos a partir de BCA y PCA en la corriente líquida, se puede observar que tanto para el BCA y PCA las concentraciones de agua varían de 826 a 949 g/L, sin embargo, los valores menores corresponden al BCA, ya que estos varían de 826 a 947 g/L y en el caso del PCA varían de 829 a 947 g/L, aunque esta pequeña diferencia puede considerarse poco significativa. En todos los casos se tiene la misma tendencia, al ir aumentando el valor de la velocidad de dilución se tiene un aumento en la concentración de agua, por lo que la relación es directamente proporcional. En el caso del aumento del número de reactores, se puede notar que la concentración de agua disminuye con este, teniendo un comportamiento más marcado conforme se aumenta la velocidad de dilución, por lo tanto, la relación entre la concentración de agua y el número de reactores es inversamente proporcional. Estas tendencias se repiten para cada una de las concentraciones de complejo enzimático y cargas de idos, por lo que las superficies son prácticamente iguales en todos los casos.

Evaporación

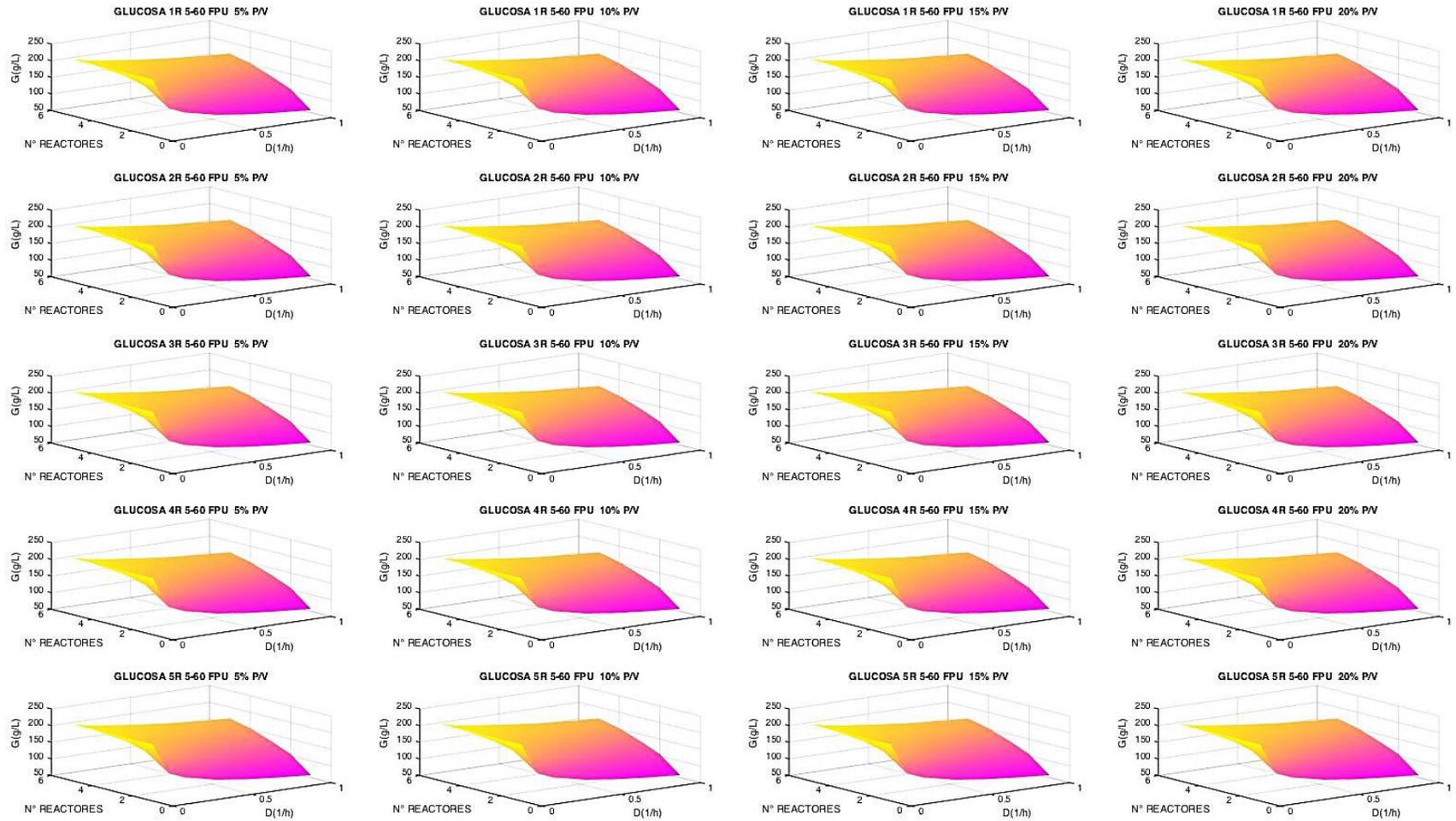


Figura 5.3 Concentraciones de glucosa obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

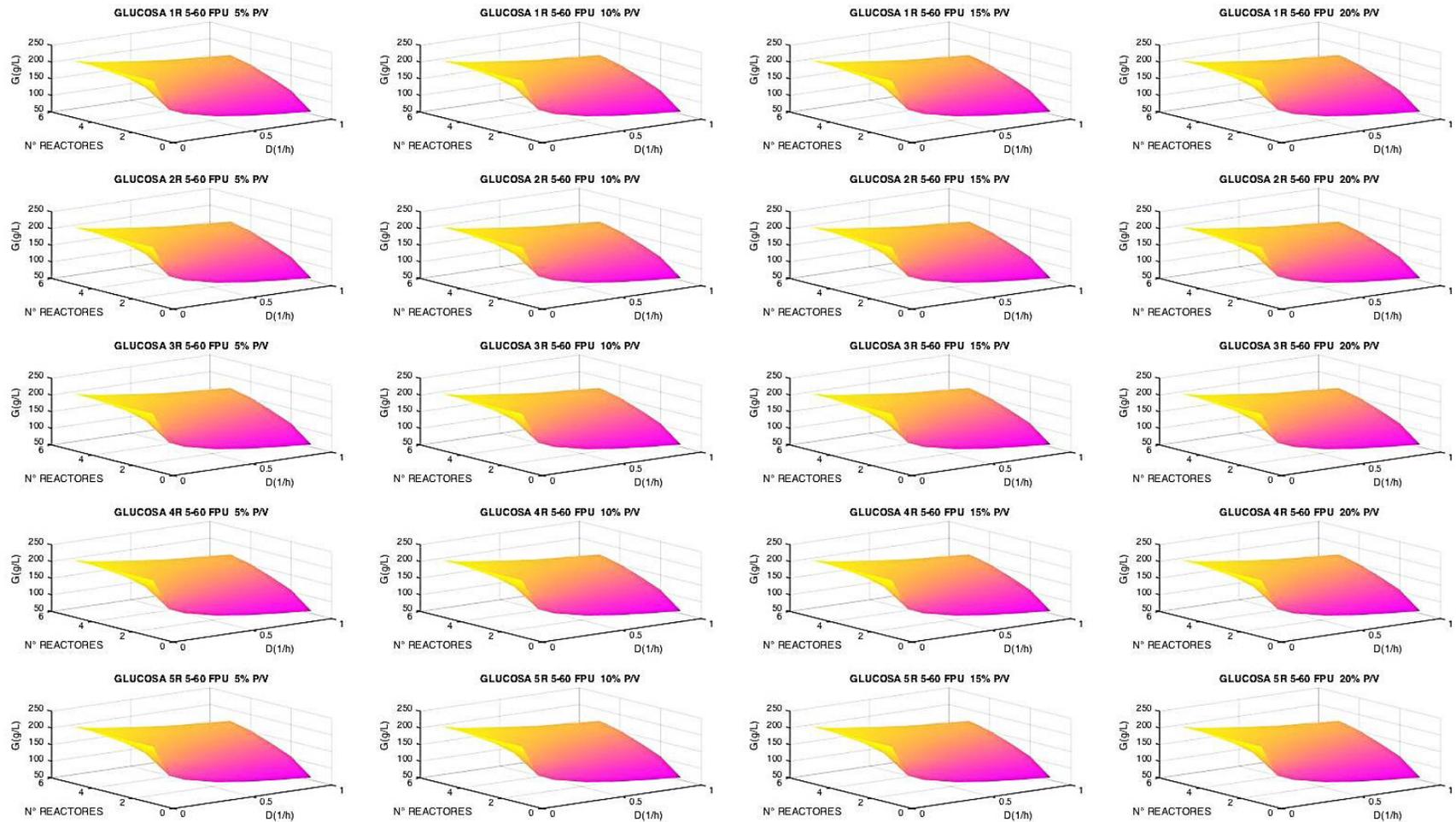


Figura 5.4 Concentraciones de glucosa obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

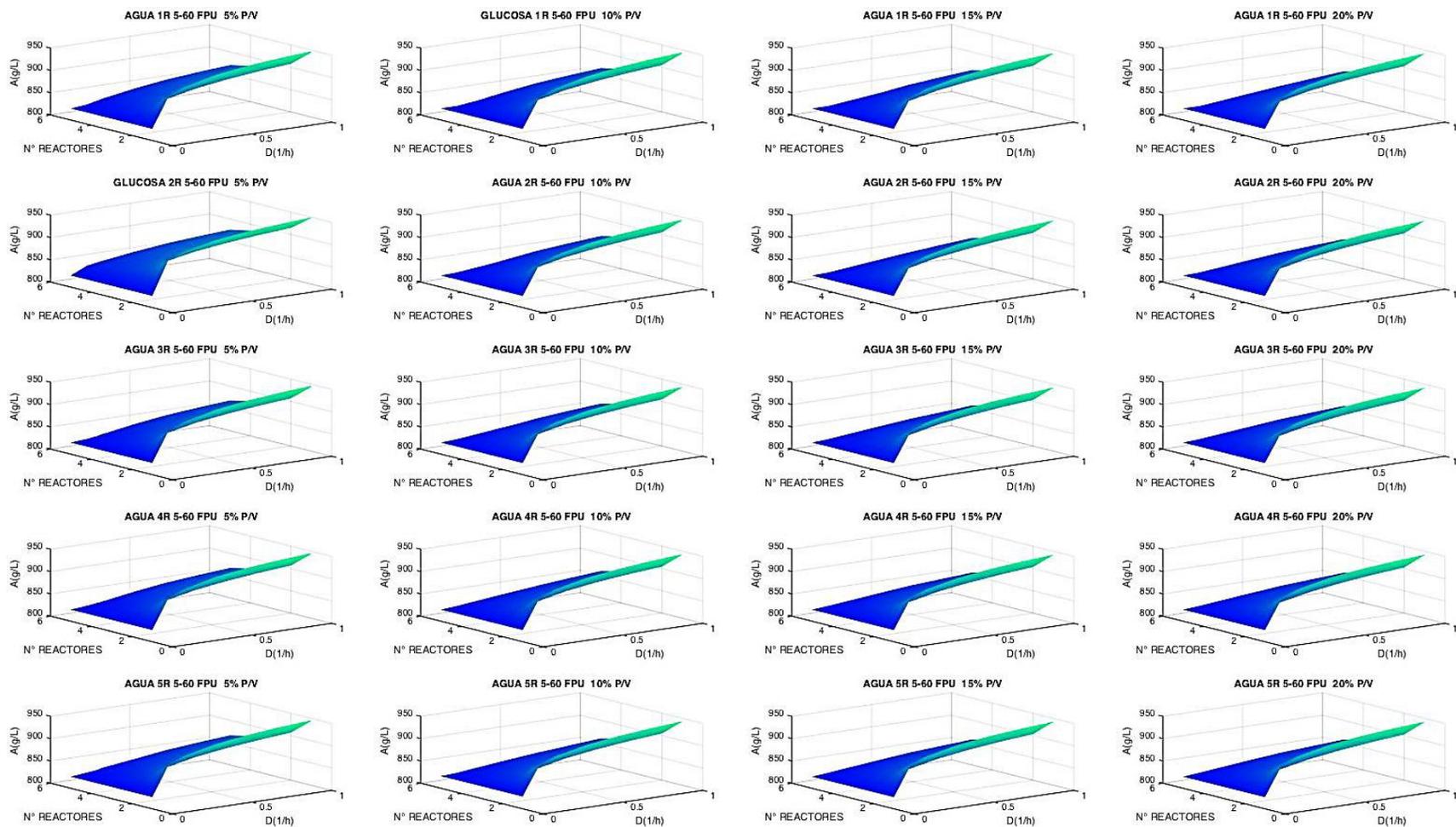


Figura 5.5 Concentraciones de agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

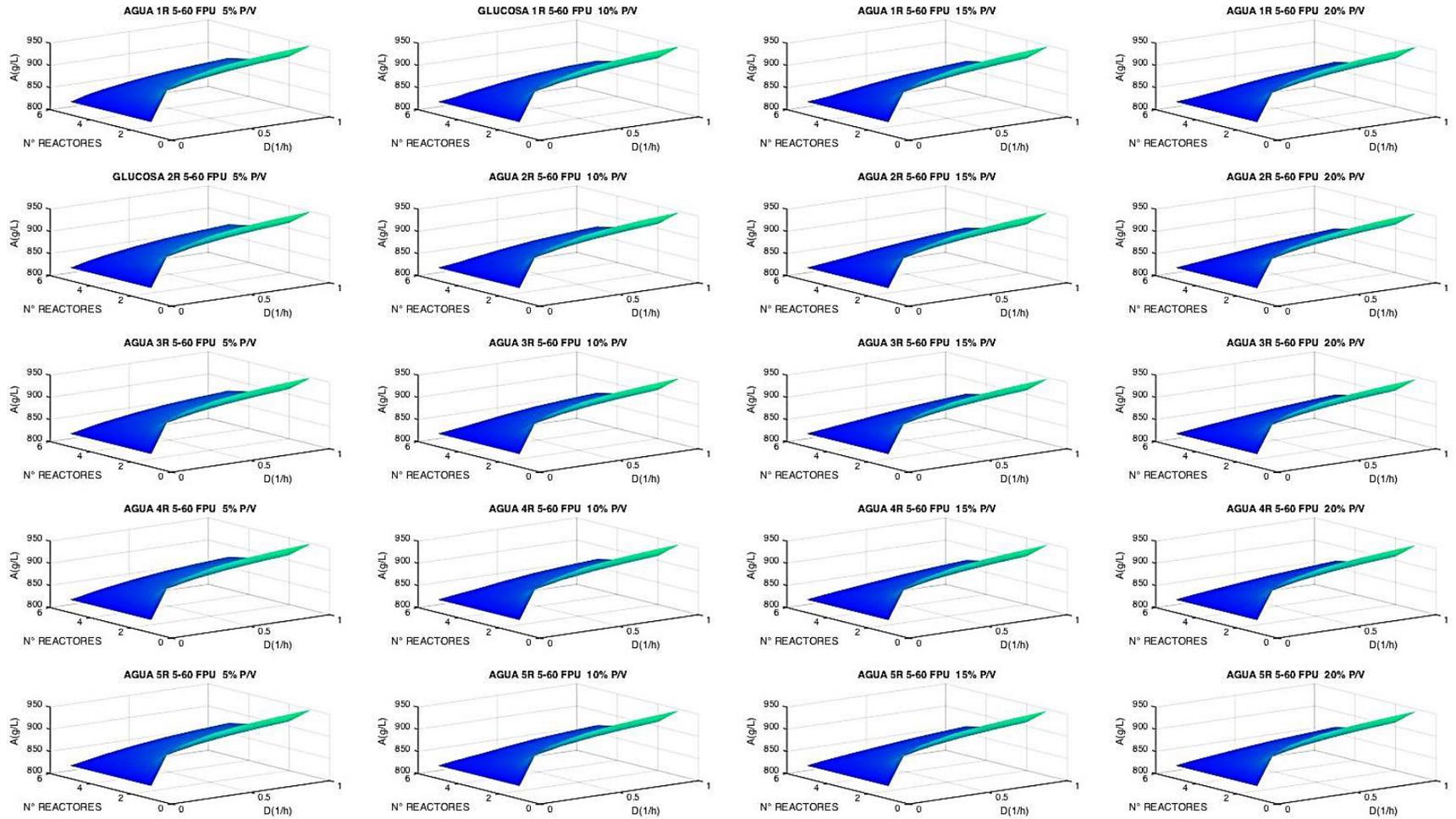


Figura 5.6 Concentraciones de agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

5.3.3 Vapor alimentado

Para el caso del vapor alimentado al sistema de evaporación, para hidrolizados filtrados de BCA y PCA, se muestran los resultados en las Figuras 5.7 y 5.8, en ellas se puede observar que existe una diferencia significativa al aumentar las cargas de sólidos, ya que con 5% p/v la mayor cantidad de vapor alimentado se encuentra en valores cercanos a 4500 kg/h, para 10% p/v se encuentra alrededor de los 2000 kg/h, para una carga de 15% p/v esta aproximadamente a los 1500 kg/h y para cargas de 20% p/v en 1000 kg/h, lo cual resulta lógico ya que al tener mayores cargas de sólidos es menor la cantidad de agua que se empleó para llevar a cabo la hidrólisis enzimática, y por lo tanto es menor la cantidad de vapor requerida para realizar la evaporación, presentándose la mayor variación al pasar del 5 al 10% p/v con una diferencia de 2500 kg/h de vapor. Cuando se tienen cargas de 5% p/v, no se tiene una diferencia significativa en las superficies de cada una de las gráficas, ya que la cantidad de vapor requerida es casi la misma para cualquier concentración de complejo enzimático, esta diferencia comienza a marcarse paulatinamente al aumentar la carga al 10% p/v, siendo más marcada con cargas de 15 y 20% p/v, por lo que en esos casos, la menor cantidad de vapor requerida se obtiene a partir de concentraciones de complejo enzimático altas, las cuales son las superficies inferiores en cada uno de los casos.

En la operación en lote se tiene cierta cantidad de vapor alimentado para cada una de las cargas, después esta desciende cuando se comienza a operar en continuo a la velocidad de dilución de 0.1, y con el incremento de esta se va incrementando la cantidad de vapor requerido, por lo que para el caso de la operación en continuo la relación es directamente proporcional. En lo que concierne a la cantidad de reactores, se puede observar que la cantidad de vapor requerido también aumenta, aunque este aumento es poco significativo ya que las superficies son casi planas y con poca pendiente, esto se obtiene ya que al aumentar la cantidad de reactores es mayor la cantidad de concentración de glucosa que se quiere concentrar, por lo tanto, la cantidad de vapor también aumentará.

En cuanto al BCA y PCA, si se observa la gráfica que corresponde a una carga de 20% p/v para hidrolizados que vienen de un tren de cinco reactores, para el BCA se requieren de 488 a 755 kg/h de vapor, y para en PCA se requieren de 552 a 760 kg/h de vapor, por lo que se requiere una menor cantidad de vapor para el BCA, este comportamiento se puede apreciar para cada uno de los escenarios.

Evaporación

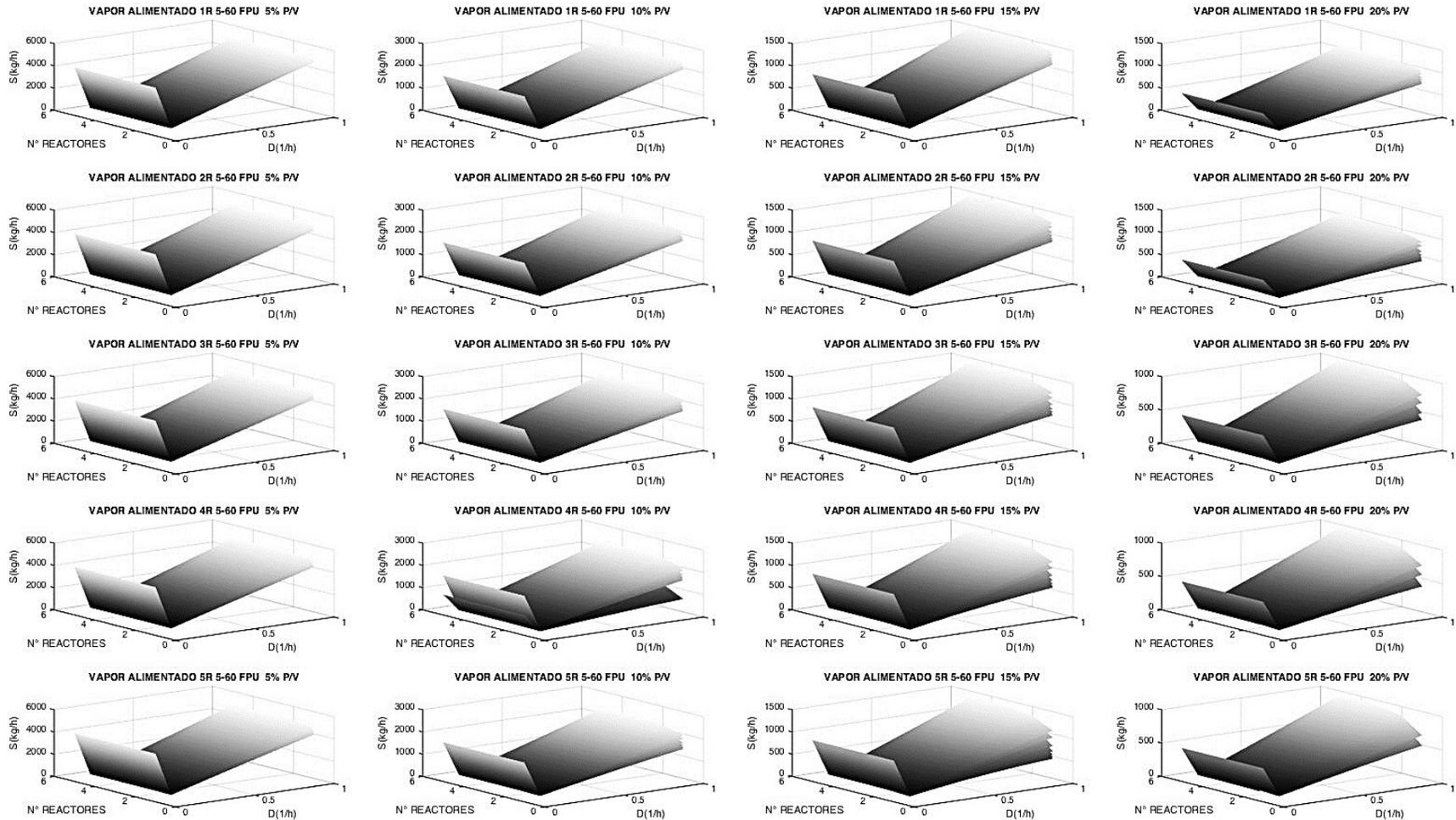


Figura 5.7 Cantidad de vapor alimentado para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

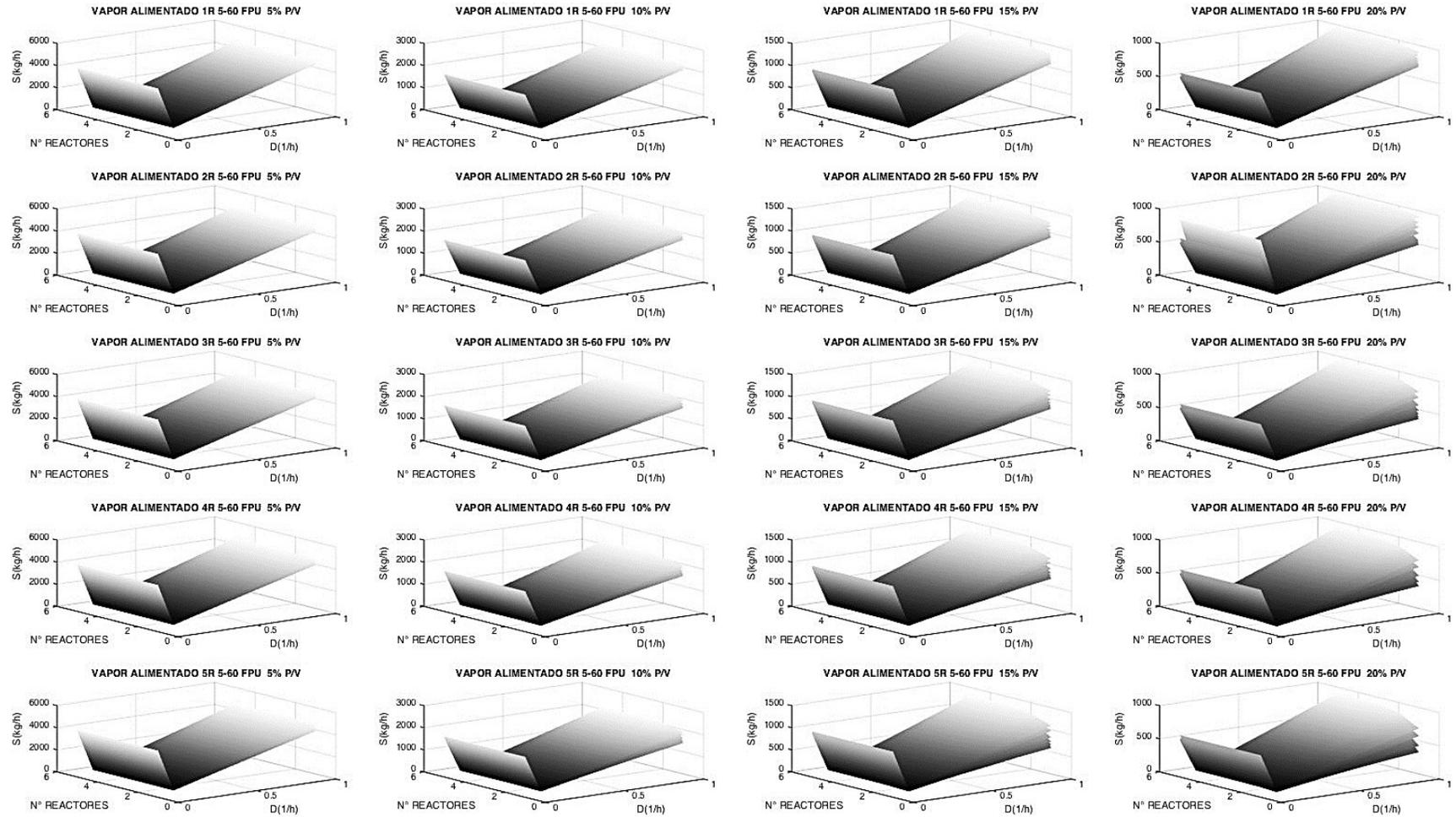


Figura 5.8 Cantidad de vapor alimentado para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

5.3.4 Vapor efecto 1

Para el vapor en el primer efecto, se tiene la misma tendencia que con el caso del vapor alimentado, al aumentar las cargas de sólidos se tiene una disminución significativa del vapor que sale del primer efecto, lo cual resulta lógico ya que, si desde un principio se alimentaron cantidades de vapor mayores con el aumento de la carga de sólidos, este comportamiento se repetiría nuevamente. Igualmente, el cambio más significativo se tiene al pasar del 5% al 10% p/v, variando de 3400 a 1600 kg/h respectivamente.

Las menores cantidades de vapor corresponden a las concentraciones de complejo enzimático más elevadas, esto puede apreciarse mejor cuando se tienen cargas de 10, 15 y 20% p/v.

Con el incremento del número de reactores, se tiene un incremento de la cantidad de vapor, esto como ya se mencionó antes, es porque es mayor la cantidad de glucosa que se desea concentrar.

La cantidad de vapor para la operación en lote es menor que para la operación en continuo cuando se trabaja con una velocidad de dilución de 0.1, y se va elevando con el incremento del valor de esta, por lo que para la operación en continuo la relación entre la velocidad de dilución y vapor es directamente proporcional.

Se puede observar que prácticamente no existen diferencias entre los vapores que salen del primer efecto para hidrolizados que provienen de uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores de hidrólisis enzimática, como se puede ir apreciando en cada una de las filas.

Con respecto a las diferencias entre el BCA y el PCA, las menores cantidades de vapor corresponden al BCA.

Esta tendencia se repite para los vapores que salen del segundo y tercer efecto, cuyos resultados se encuentran representados en las Figuras A.1.1, A.1.2, A.2.1 y A.2.2 del apéndice A. Al observar estas figuras, se puede apreciar que la relación entre los vapores es $V_1 < V_2 < V_3$.

Evaporación

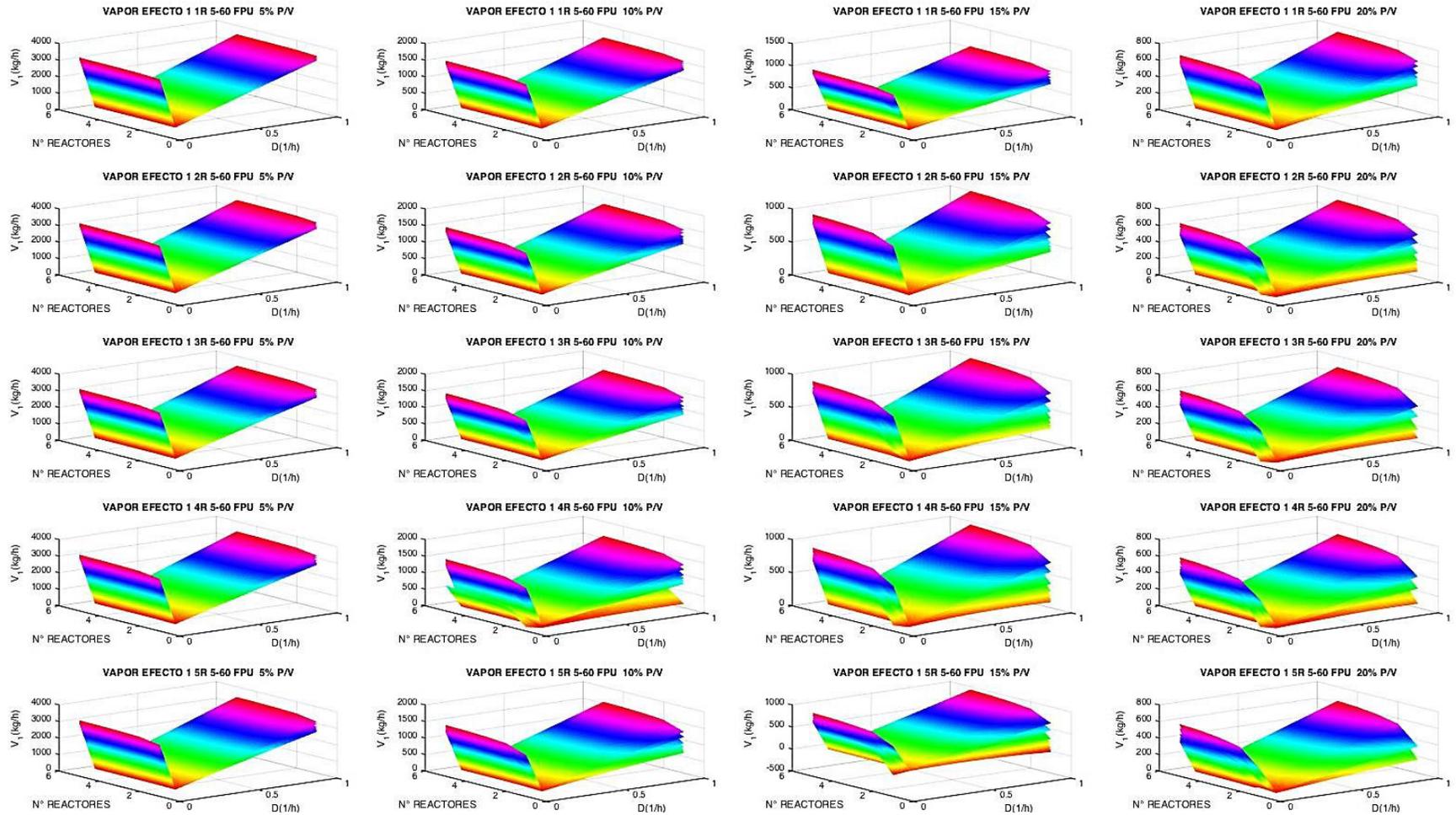


Figura 5.9 Cantidad de vapor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

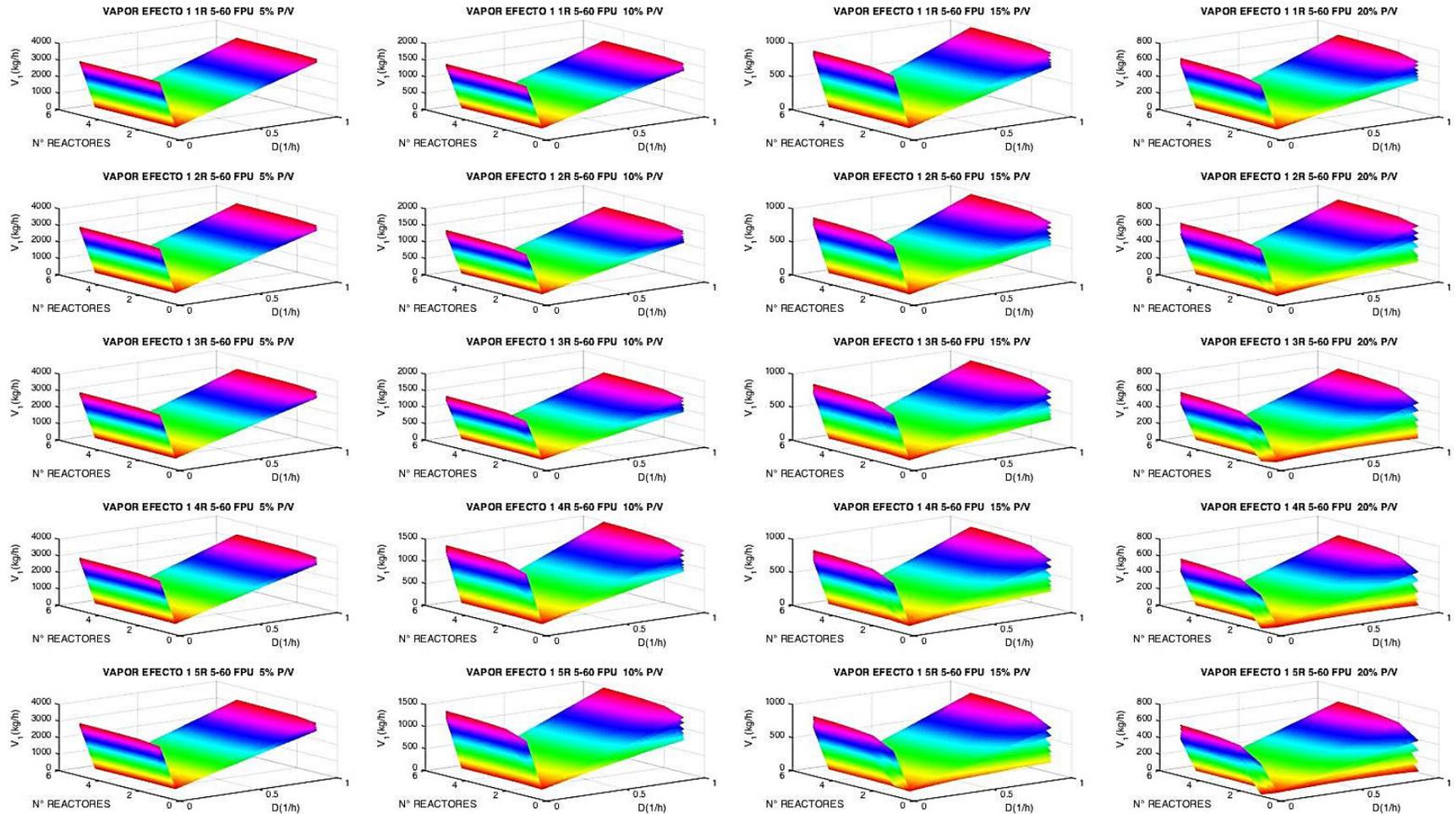


Figura 5.10 Cantidad de vapor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

5.3.5 Velocidad de transferencia de calor y área en efecto 1

En las figuras 5.11-14 se muestran los resultados obtenidos para la velocidad de transferencia de calor y área en el primer efecto para BCA y PCA respectivamente, se puede apreciar que se tiene de nuevo la misma tendencia que con el vapor alimentado y el vapor en el primer efecto.

Al aumentar las cargas de BCA y PCA la velocidad de transferencia de calor y área también aumentan, igualmente siendo más notorio este cambio al pasar del 5 al 10% p/v.

De la misma forma, la velocidad de transferencia de calor y área para la operación en lote, es decir cuando la velocidad de dilución es igual a cero, es mayor que para la operación en continuo cuando se trabaja con una velocidad de dilución igual a 0.1, pero igualmente los valores de están aumentan con el incremento de la velocidad de dilución.

Las menores velocidades de transferencia de calor y área corresponden a las mayores concentraciones de complejo enzimático, esto no es tan notorio cuando se trabaja con una carga de 5% p/v, pero al aumentar la carga se puede notar la variación que existe entre las superficies para las diferentes concentraciones de complejo enzimático.

Del mismo modo, se puede notar que no existe una diferencia significativa en cuanto a las velocidades de transferencia de calor y áreas cuando se evaporan hidrolizados que provienen de uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores.

El BCA requiere las menores velocidades de transferencia de calor, y por consecuencia las menores áreas en comparación con el PCA, aunque esta variación resulta poco significativa, es con el BCA donde se requiere la menor cantidad de energía.

En el apéndice A se encuentran las Figuras A.1.3-A.1.6 y A.2.3-A.2.6 donde se puede observar que esta tendencia se repite para las velocidades de transferencia de calor y áreas para el segundo y tercer efecto, al observarlas es posible apreciar que las velocidades de transferencia de calor y áreas son mayores para el primer efecto con respecto al segundo y el tercero, pero las del tercer efecto son mayores a las del segundo, por lo que la relación entre estas es la misma que la obtenida en la simulación siendo que $q_1 > q_2 < q_3$, donde $q_1 > q_3$ y $A_1 > A_2 < A_3$, donde $A_1 > A_3$.

Evaporación

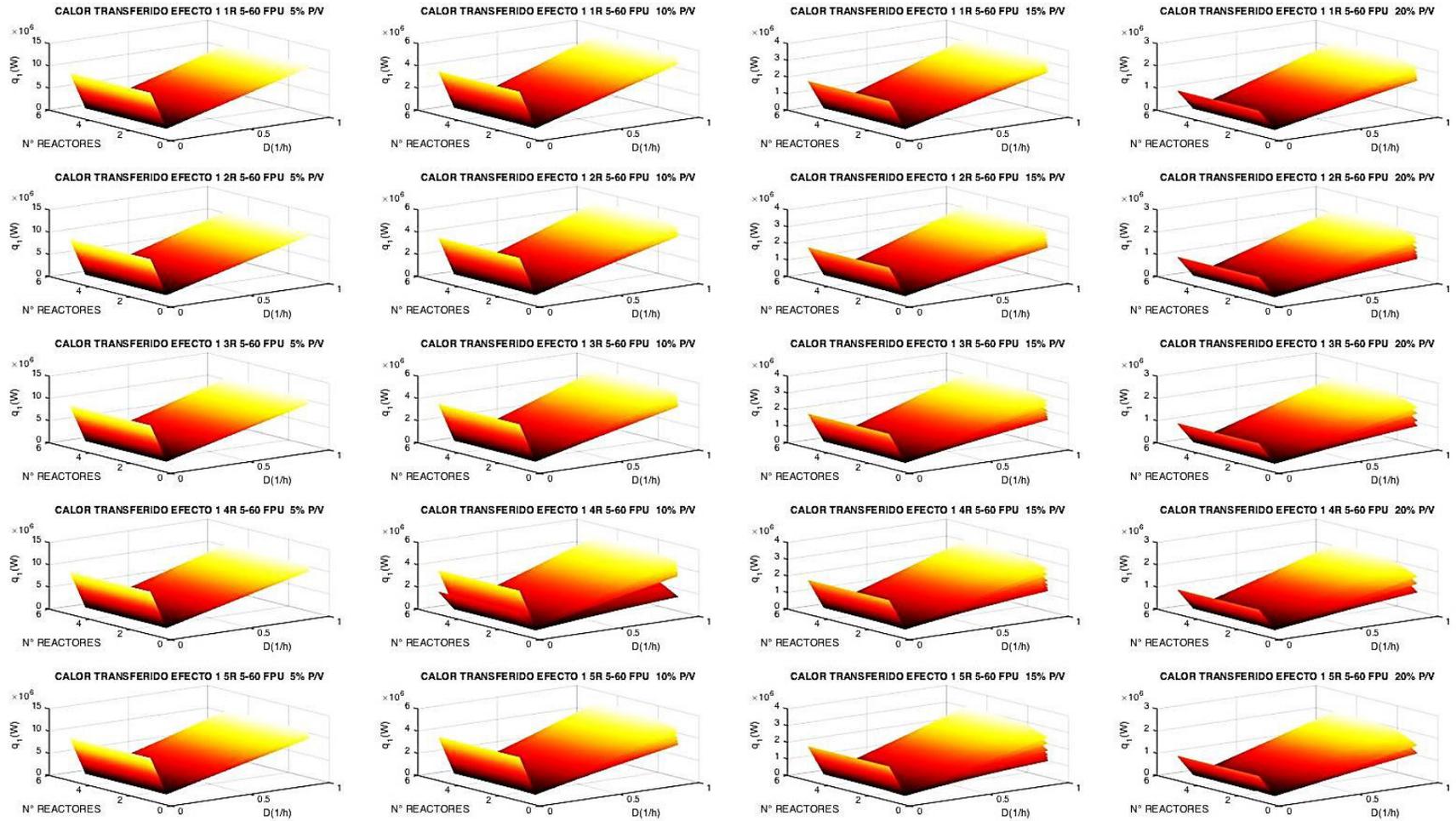


Figura 5.11 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

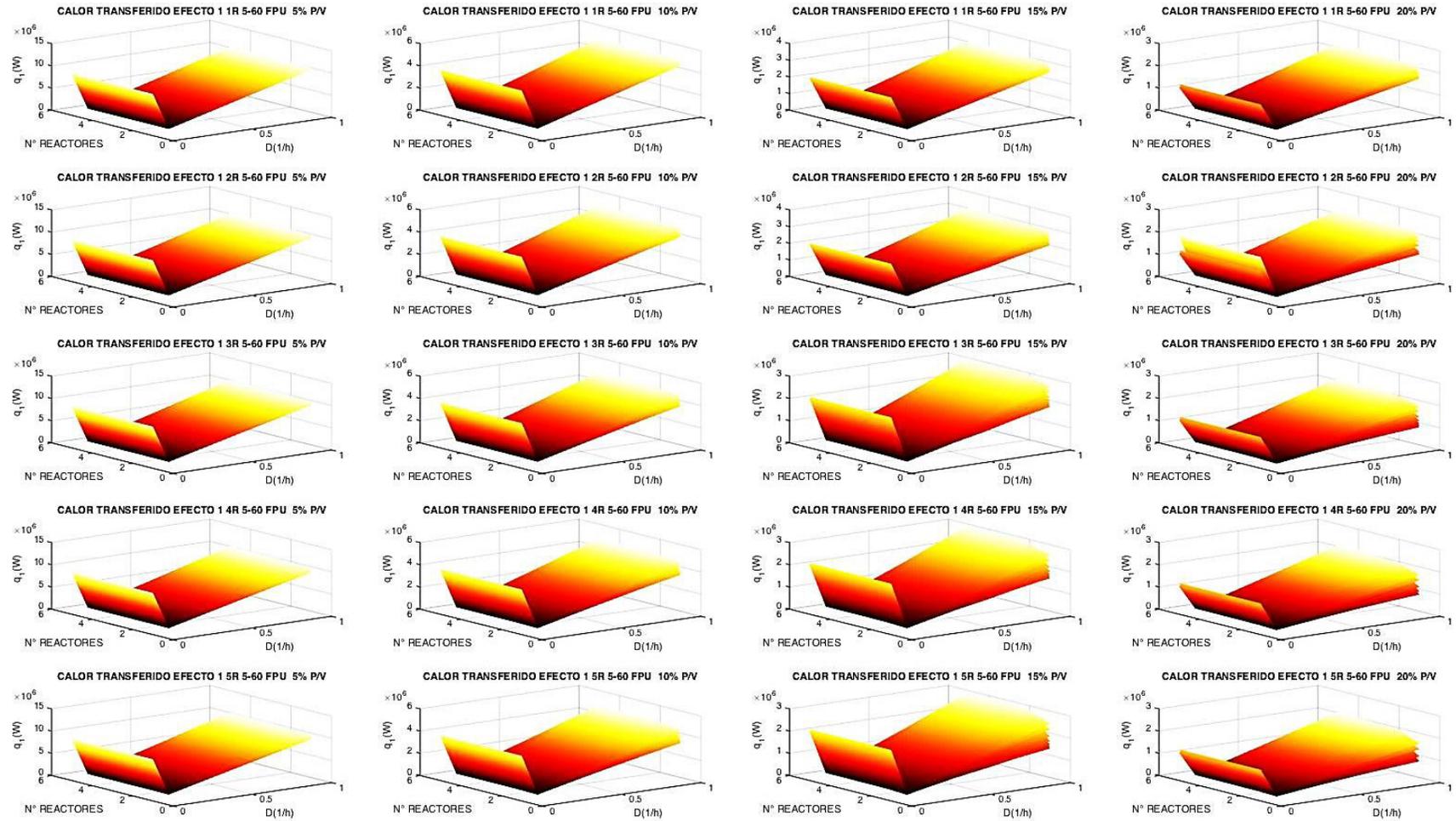


Figura 5.12 Velocidad de transferencia de calor en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

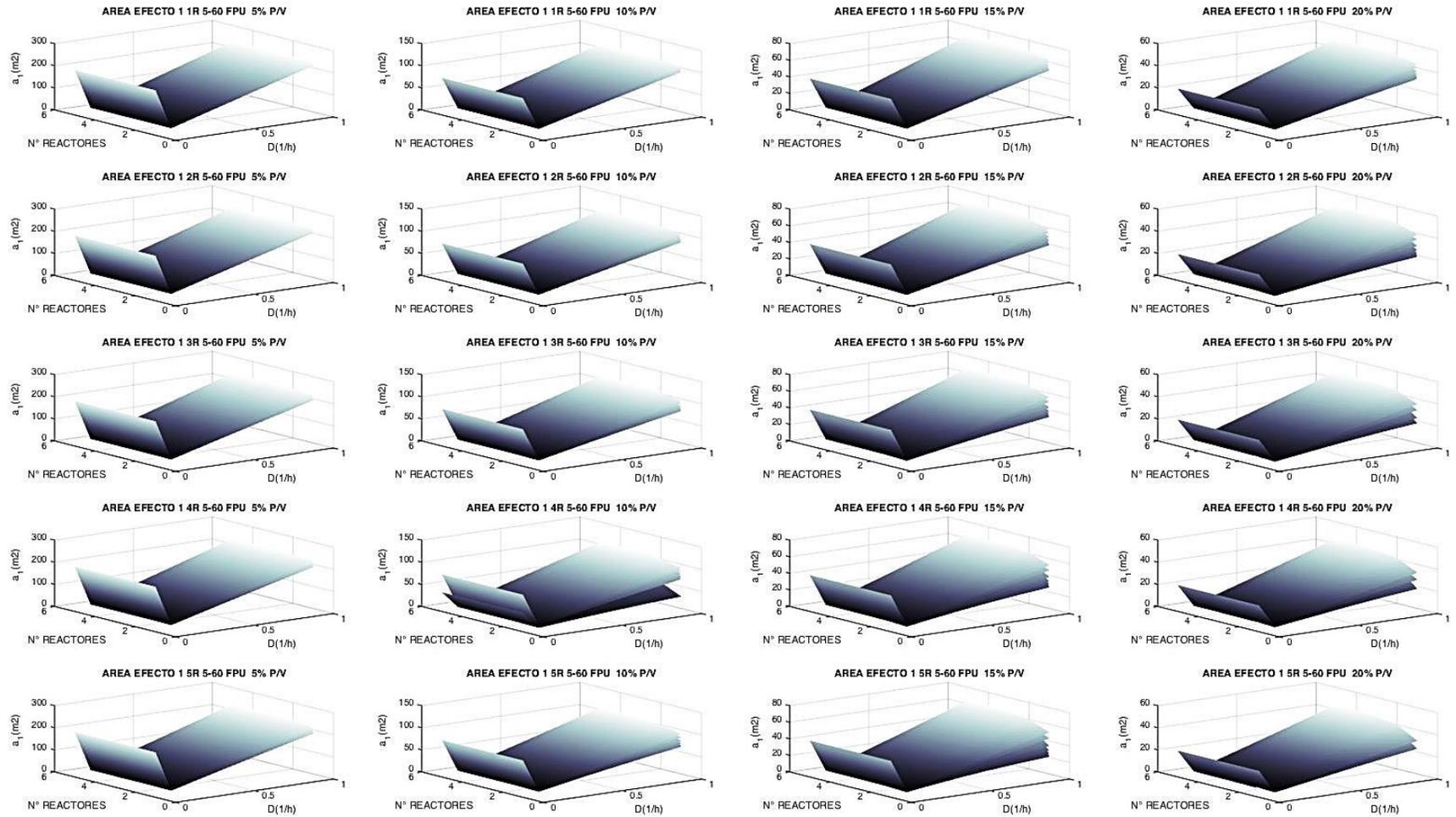


Figura 5.13 Área en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

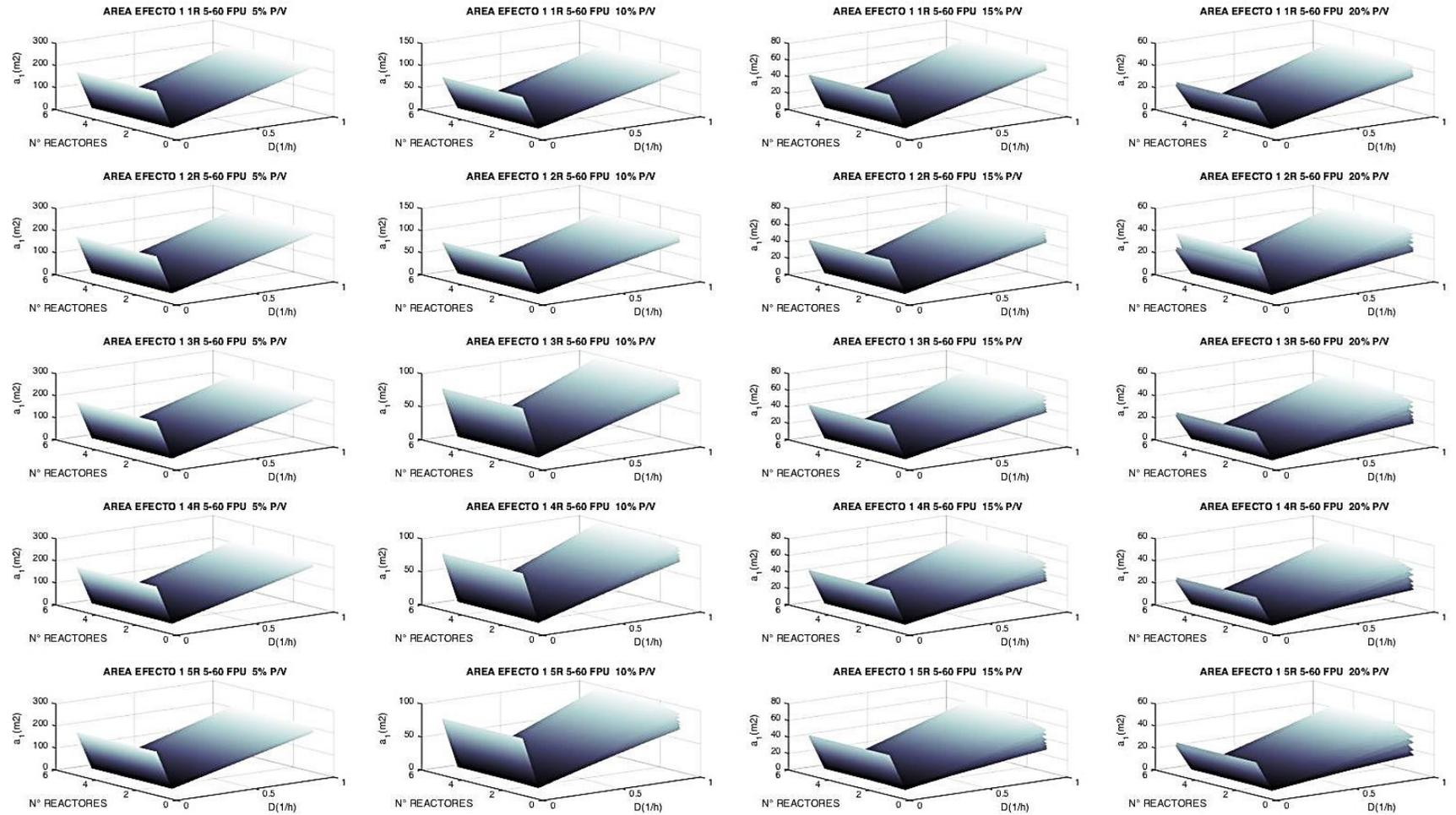


Figura 5.14 Área en efecto 1 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

5.3.7 Fracción x_3 en la corriente líquida que sale del tercer efecto

En las Figuras 5.15 y 5.16 se muestran los resultados de los valores de x_3 que se requieren para obtener las concentraciones de glucosa presentados en la Tabla 5.27, obteniéndose 4900 valores de estos, como se puede apreciar la tendencia es exactamente la misma que la de la concentración de glucosa.

No es posible apreciar la diferencia entre las superficies correspondientes a las concentraciones de complejo enzimático en cada una de las gráficas, ya que la concentración de glucosa se fijó desde un inicio, tampoco existe una diferencia entre los valores de x_3 que se obtienen al evaporar hidrolizados provenientes de uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores de sacarificación.

La fracción x_3 aumenta ligeramente al aumentar las cargas de sólidos, pero todas se encuentran en valores cercanos a 0.23 cuando se tiene la mayor cantidad de reactores a bajas velocidades de dilución.

El mayor valor de x_3 corresponde a la operación en lote, sin embargo, este valor es casi igualado al aumentar la velocidad de dilución a 0.1 con concentraciones de complejo enzimático elevadas y con un mayor número de reactores, y después va disminuyendo con el aumento de la velocidad de dilución, por lo tanto, la relación entre x_3 y la velocidad de dilución es inversamente proporcional.

En lo que concierne a la cantidad de reactores, al aumentar el número de estos también aumenta el valor de x_3 , acercándose mucho al valor de x_3 en la operación en lote, por lo que la relación entre estos es directamente proporcional.

El BCA requiere un valor menor de x_3 en comparación que con el PCA, sin embargo, esta diferencia es poco significativa y puede ser despreciable.

Evaporación

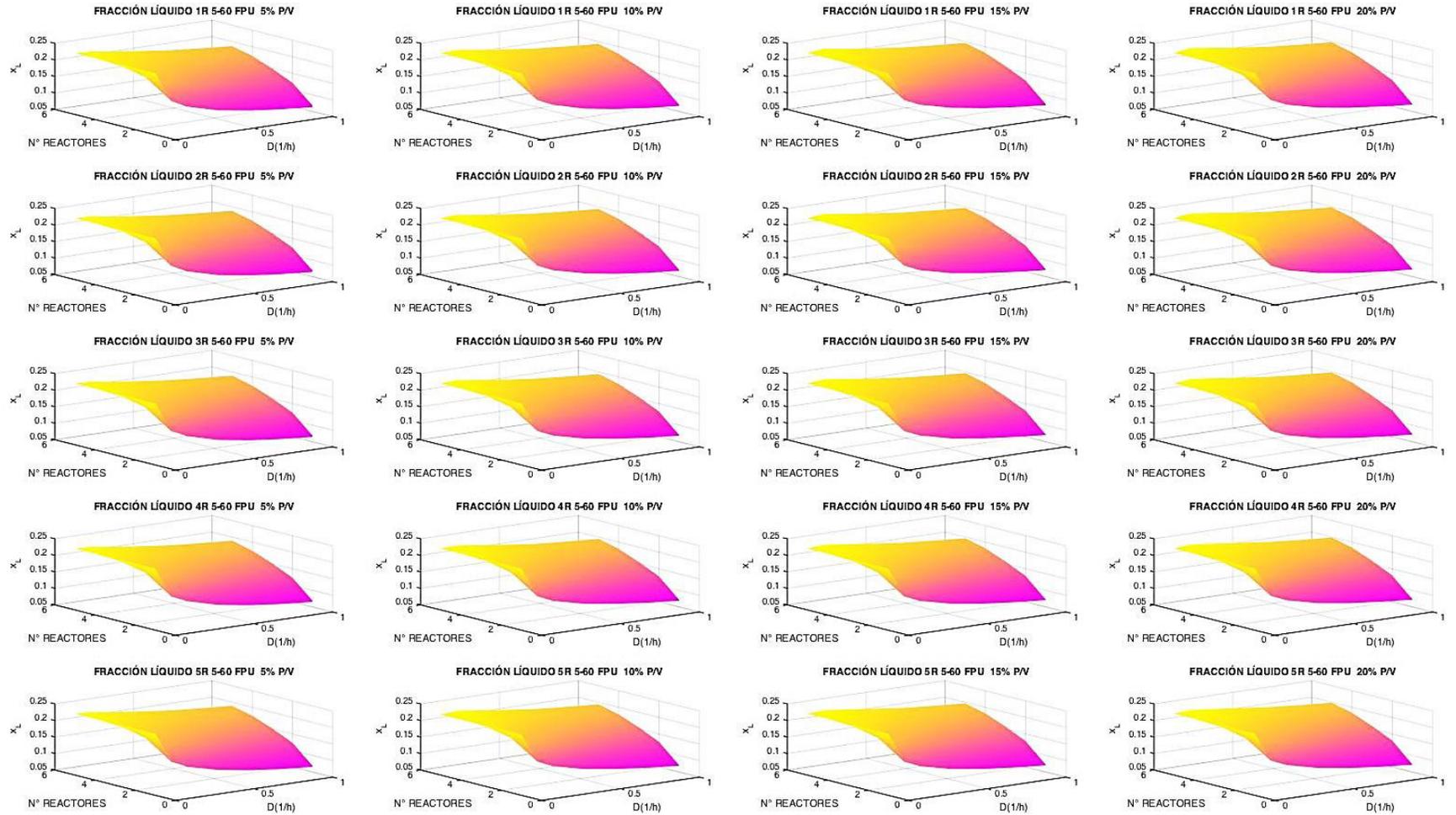


Figura 5.15 Valor de x_3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

Evaporación

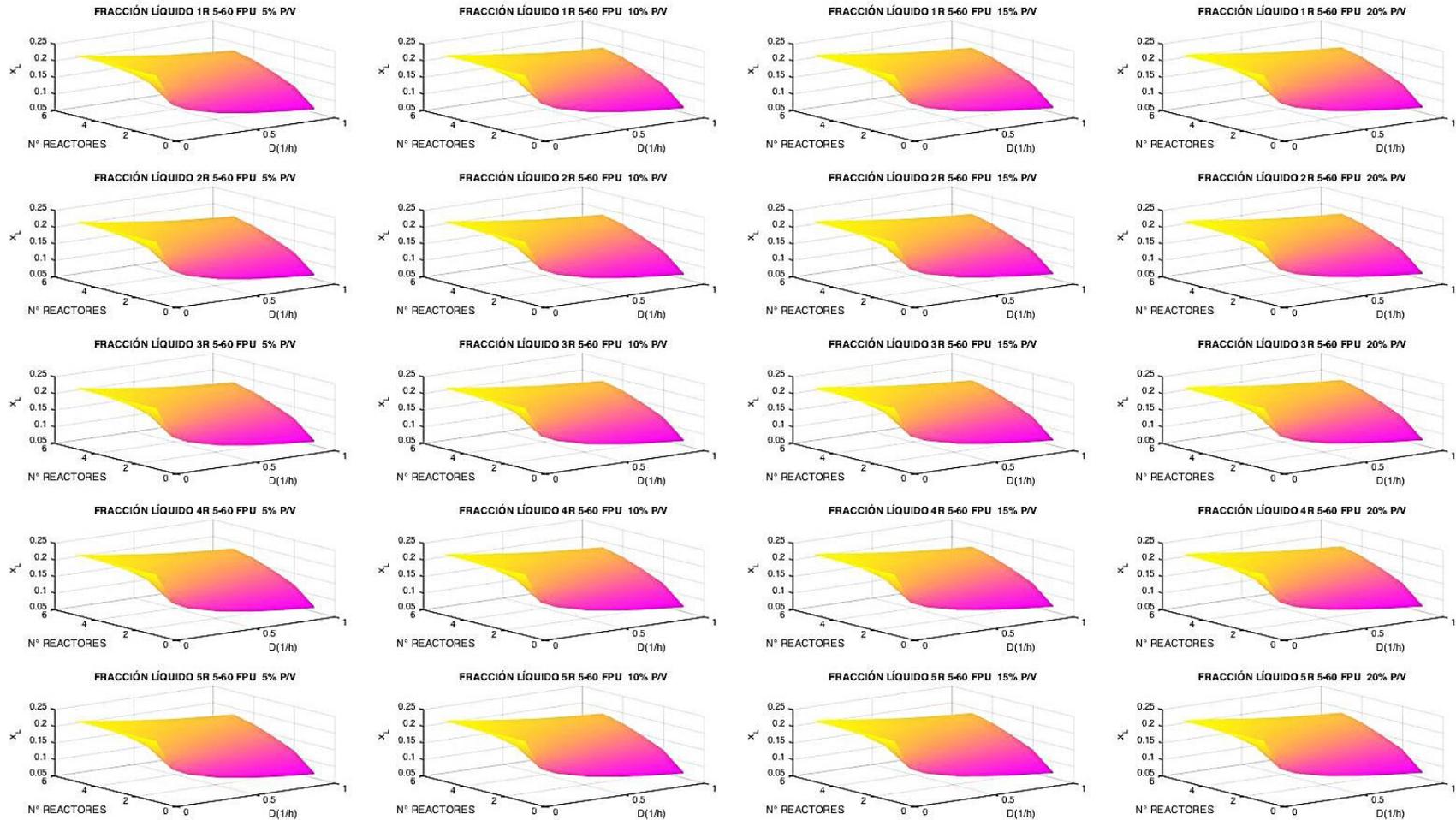


Figura 5.16 Valor de x_3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

5.4 Conclusiones

De los estudios realizados, se obtuvo que la fracción correspondiente al líquido que sale del tercer efecto debe oscilar en valores 0.23 a 0.05 para satisfacer los valores de concentración de glucosa requeridos.

Con el aumento de las cargas de sólidos y concentraciones se requiere una menor cantidad de vapor alimentado, menores velocidades de transferencia de calor y áreas.

No se encontró una diferencia significativa al tratar hidrolizados provenientes de trenes de reactores de sacarificación, ya que la variación en cada una de las variables estudiadas fue mínima.

Las velocidades de dilución bajas favorecen el proceso de evaporación al tener los menores requerimientos energéticos y obtener las concentraciones de glucosa deseadas.

Al aumentar el valor de la concentración de glucosa que se desea obtener aumentar el número de reactores que se requerirán para llevar a cabo la fermentación, por lo que también aumentarán la cantidad de vapor alimentado, el vapor entre efectos, las velocidades de transferencia de calor, las áreas y las fracciones en el líquido.

Los mejores resultados para cada una de las variables estudiadas en los diferentes escenarios fueron para el BCA, sin embargo, no existe una diferencia significativa en cuanto al PCA, por lo que con este estudio se demostró que aunque se obtengan muy bajas concentraciones de glucosa provenientes de hidrolisis enzimática en continuo, al efectuar una concentración de esta por evaporación se pueden obtener corrientes con concentraciones de glucosa deseables y equiparables a las de la operación en lote, para realizar posteriormente una fermentación en continuo para ambas biomasas como se verá en el siguiente capítulo.

6. Fermentación para la obtención de bioetanol 2G

La importancia económica de la producción de bioetanol promueve la necesidad de mejorar el desempeño de los procesos fermentativos, para lo cual se requiere obtener las mejores condiciones de operación, por lo que es necesario contar con un conocimiento profundo de la dinámica del proceso de estudio.

En este capítulo se aborda el estudio realizado a la etapa de fermentación, en la primera sección se describe el modelo matemático empleado, en la segunda sección se realizó una simulación para conocer y visualizar el comportamiento del proceso y determinar si existen puntos críticos en función de alguna variable esto para operación en lote y operación en continuo para un tren de reactores, en la tercera sección se realizó el diseño del proceso mediante la especificación de los valores de las variables de salida en función de los puntos críticos encontrados, en la cuarta sección se efectuó la validación de los resultados obtenidos mediante la optimización por “Algoritmos genéticos” teniendo como funciones objetivo la maximización de la concentración de etanol producido y la minimización de la concentración de sustrato en la corriente de salida.

6.1 Marco de diseño y reacción

6.1.2 Descripción del proceso de fermentación y modelo matemático

El estudio llevado a cabo por Andrietta (1994) inicialmente consistía en cuatro reactores de mezcla perfecta conectados en serie y con levadura reciclada, pero más tarde pasó a estar constituido por cinco reactores de mezcla perfecta en operación continua. Cada reactor poseía un sistema externo de intercambio de calor con el objetivo de mantener la temperatura constante del medio de reacción, ya que la conversión de glucosa a etanol es un proceso muy exotérmico.

Fermentación

Después el vino crudo pasa por un proceso de separación mecánica para separar los microorganismos por medio de un conjunto de seis centrifugas, de ahí se obtiene el alcohol deslevadurado como producto final, y el resto de levadura pasa a una unidad de tratamiento ácido para después volver al primer reactor. Se trabajaron diversas configuraciones de operación, sin señalar si alguna configuración era óptima.

Por lo que sería conveniente determinar una óptima configuración de equipo-condiciones de proceso de un sistema de reactores de tanque agitado en operación continua para producción a gran escala de bioetanol. Sin embargo, debido a la complejidad del sistema, se comenzó por encontrar las condiciones óptimas a las cuales se puede operar solo un reactor en el trabajo realizado en Peñaloza (2014).

En este trabajo se consideró un tren de reactores de tanque agitado en operación en continuo, con un volumen determinado, a cierta temperatura constante (T), azúcar reductor (S) es fermentado con cierta levadura (C) para producir etanol (P), la fermentación es realizada en forma anaeróbica. El siguiente mecanismo de reacción simplificado es usado para objetivos de modelado matemático:



La corriente de entrada del primer reactor contiene cierta concentración de levadura, formada por la levadura que se alimenta en un inicio, y por pequeñas trazas provenientes del reciclo que se tiene en el tren de reactores, y también se agrega levadura fresca para compensar la pérdida que se da en el reciclo. A su vez, se considera que la corriente de entrada contiene etanol por las trazas que pueden provenir del reciclo tal y como se muestra en la Figura 6.1.

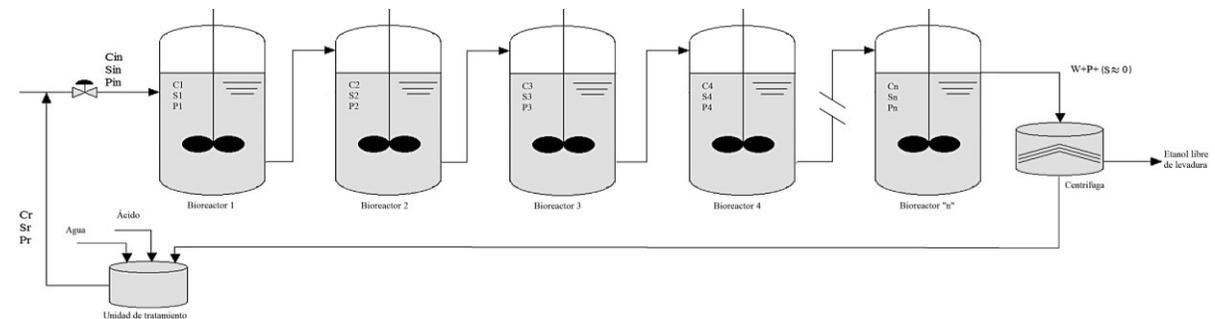


Figura 6.1 Esquema de un tren de biorreactores de tanque agitado de operación en continuo con reciclo para la producción de bioetanol.

Fermentación

Sobre la base de los mecanismos cinéticos y balances de masa, el comportamiento del tren de reactores esta descrito por el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias:

Balance de levadura

$$\frac{dC_j}{dt} = r_g + D(C_{j-1} - C_j) \quad C_j(t_0) = C_0^j \quad C_0 = C_e \quad (6.2)$$

Balance de glucosa

$$\frac{dS_j}{dt} = -Y_{s/c} \cdot r_g + D(S_{j-1} - S_j) \quad S_j(t_0) = S_0^j \quad S_0 = S_e \quad (6.3)$$

Balance de etanol

$$\frac{dP_j}{dt} = +Y_{p/c} \cdot r_g + D(P_{j-1} - P_j) \quad P_j(t_0) = P_0^j \quad P_0 = P_e \quad (6.4)$$

Dónde:

D es la velocidad de dilución ($D=F/V>0$) (1/h).

F es la velocidad del flujo de entrada.

V es el volumen.

C_{j-1} es la concentración de levadura en la corriente de entrada en el reactor "j-1" (g/L).

S_{j-1} es la concentración de sustrato en la corriente de entrada en el reactor "j-1" (g/L).

P_{j-1} es la concentración de etanol en la corriente de entrada en el reactor "j-1" (g/L).

C_j es la concentración de levadura en la corriente de salida en el reactor "j" (g/L).

S_j es la concentración de sustrato en la corriente de salida en el reactor "j" (g/L).

P_j es la concentración de etanol en la corriente de salida en el reactor "j" (g/L).

r_g es la velocidad de crecimiento de levadura (g/Lh).

Una cuarta ecuación diferencial ordinaria corresponde a la concentración de dióxido de carbono producido:

Balance de dióxido de carbono

$$\frac{dG_j}{dt} = r_G + D(G_{j-1} - G_j) \quad G_j(t_0) = G_0^j \quad G_0 = G_e \quad (6.5)$$

Dónde:

G_{j-1} es la concentración de dióxido de carbono en la corriente de entrada en el reactor "j-1" (g/L).

G_j es la concentración de dióxido de carbono en la corriente de salida en el reactor "j" (g/L).

Q representa el gas liberado de la mezcla reaccionante en el reactor.

r_G es la velocidad de formación de gas (g/Lh).

Fermentación

Los principales factores que intervienen en la velocidad específica de crecimiento de levadura son las concentraciones de ART (azúcares totales reducidos), células de levadura en el etanol y temperatura:

$$r_g = F(S, C, P, T) \quad (6.6)$$

En el caso de la glucosa que es fermentada por *Saccharomyces cerevisiae* en un reactor industrial el modelo matemático siguiente es capaz de representar con buena precisión el comportamiento del proceso.

Siendo este modelo derivado del modelo de Monod su comportamiento es aplicable a procesos de fermentación alcohólica de estado estacionario, o con una dinámica lenta como el caso de los procesos fermentativos. (Cordeiro 2005).

$$r_g = \mu_{max} \frac{S}{S + k_S} \cdot C \cdot \left(1 - \frac{C}{C_M}\right)^{m_c} \cdot \left(1 - \frac{P}{P_M}\right)^{m_p} \quad (6.7)$$

Donde:

S es la concentración de ART (g/L).

k_S es la constante de afinidad de sustrato (g/L).

C es la concentración de células (g/L).

C_M es la concentración de células cuando el crecimiento celular termina (g/L).

P es la concentración de etanol (g/L).

P_M es la concentración de etanol cuando el crecimiento celular termina (g/L).

m_C es el termino de potencia de inhibición para la concentración celular.

m_P es el termino de potencia de inhibición para el producto.

Donde:

Y_{S/C} es el coeficiente de consumo de azúcar.

Y_{P/C} es el rendimiento de etanol.

μ_{max} representa la velocidad máxima de crecimiento y es afectada por la temperatura y siendo definida por la ecuación de Arrhenius:

$$\mu_{max} = A_\mu \cdot e^{-\frac{E_\mu}{R(T+T_K)}} \quad (6.8)$$

Para temperaturas por debajo de 32° C, el valor de P_{max} es considerado constante e igual a 103 g/L. Los valores de los parámetros de los procesos supuestos en este trabajo son aquellos

Fermentación

posibles de obtener en la industria, capaces de llevar a valores de productividad aceptables sin comprometer la factibilidad económica y operacional del proceso.

$$Y_{S/C} = 30.3030 \text{ g-S/g-C.}$$

$$Y_{P/C} = 13.4848 \text{ g-P/g-C.}$$

$$k_S = 1.6 \text{ g/L.}$$

$$C_M = 100 \text{ g/L.}$$

$$P_M = 103 \text{ g/L.}$$

$$m_C = 0.9.$$

$$m_P = 3.0.$$

$$A_\mu = 4.5 \times 10^{10} \text{ 1/h.}$$

$$E_\mu = 1.54 \times 10^4 \text{ cal/mol.}$$

$$R = 1.987 \text{ cal/mol } ^\circ \text{C.}$$

$$d = 0.0676 \text{ 1/}^\circ \text{C.}$$

$$T_K = 273.15 \text{ K.}$$

$$T_P = 32^\circ \text{C.}$$

El proceso se lleva de tal manera que los azúcares reductores alimentados se consumen casi por completo en el sistema de fermentación propuesto por Andrietta (1994), por lo que tomando como base el trabajo realizado en Peñaloza (2014), el objetivo del presente trabajo fue determinar las condiciones de entrada para las cuales se consume casi totalmente el sustrato suministrado para un tren de reactores en estado estacionario y con el cual se obtiene la mayor concentración posible de etanol, de acuerdo con el rendimiento que se reporta del sistema, representado por la siguiente ecuación:

$$Y_{P/S} = \frac{Y_{P/C}}{Y_{S/C}} \tag{6.9}$$

Donde $Y_{P/S}$ es el coeficiente de rendimiento producto-sustrato.

Debe tomarse en cuenta que para este sistema la velocidad específica de crecimiento de células de levadura y la velocidad específica de producción de etanol son afectadas por la concentración de etanol cuando no hay sustratos limitando, por lo que, en el caso de la inhibición de levadura, esta podría tener una pérdida de viabilidad con el tiempo si permanece en un medio con alto contenido de etanol (Aiba et al. 1968).

Una concentración de azúcares reductores en un medio de alimentación debe ser tal que la concentración de etanol obtenida, este dentro de un intervalo que no tenga efectos negativos para la fermentación (Andrietta 1994).

6.1.3 Marco de trabajo del problema de diseño

El reactor, por lo tanto, puede visualizarse como un sistema de cuatro entradas (S_{j-1} , C_{j-1} , P_{j-1} , D) y tres salidas (S_j , C_j , P_j), por lo que es necesario determinar los valores de las cuatro entradas para los cuales se obtenga una corriente de salida con una máxima concentración de etanol pero con el consumo total de azúcar para el tren de reactores.

Para ello es necesario resolver las ecuaciones algebraicas del modelo matemático anteriormente presentado, y haciendo uso de la construcción de superficies de respuesta de las concentraciones de etanol y glucosa en el tren de reactores con respecto al espacio de valores que pueden tomar las entradas del proceso (o condiciones de operación). La estimación de las concentraciones de sustrato y etanol que se obtienen a ciertas condiciones se calculara en base al modelo matemático. A través de estas superficies se pretende visualizar los puntos máximos y/o mínimos que existan en el proceso. De los resultados obtenidos en Peñaloza (2014), se puede observar que se encontró un punto crítico que en este caso resulto ser un mínimo para la concentración de sustrato no convertido, un máximo para la velocidad de crecimiento de levadura y en consecuencia un máximo para la producción de etanol el cual se obtiene cuando la concentración de levadura en la corriente de es igual a 52 g/L, también se trabajaron escenarios en los que se tenía una concentración de 30 y 25 g/L de levadura en la corriente de salida. Tomando como base dichos resultados obtenidos para un solo reactor en continuo, para el presente trabajo se tienen dos ambientes de modelado:

Problema de simulación: determinar a través de simulaciones para un tren de dos, tres, cuatro y cinco reactores cuáles son los valores de las variables de entrada que proporcionan la mayor concentración de etanol, para observar el comportamiento del tren de reactores, teniendo como entrada de perturbación el alcohol alimentado en la entrada explorando todas las variables de entrada, así como determinar si existen puntos críticos en función de alguna de las variables anteriormente mencionadas, esto puede visualizarse en la Figura 6.2.

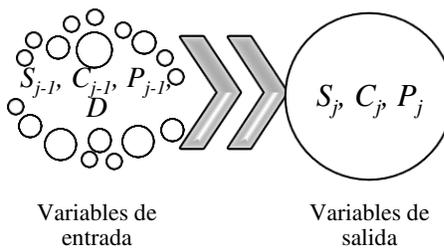


Figura 6.2 Escenario de simulación en el que se suponen valores para las variables de entrada en el proceso para la obtención de valores de las variables de salida.

Fermentación

Una vez que se comprobó que se tenía el mismo comportamiento y la existencia de los puntos críticos, lo siguiente es resolver el siguiente ambiente de modelado.

Problema de diseño: determinar cuáles son los valores de las variables de entrada que proporcionan la mayor concentración de etanol, con el "casi"-total consumo de azúcar (es decir con un valor cercano a cero de S), teniendo como entrada de perturbación el alcohol alimentado en la entrada explorando todas las variables y con restricciones en las concentraciones de las variables de salida, como se muestra en la Figura 6.3.

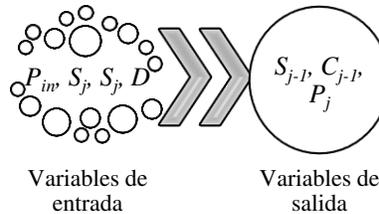


Figura 6.3 Escenario de diseño en el que se fijan los valores para las nuevas variables de entrada en el proceso para la obtención de nuevos valores de las variables de salida.

6.2 Simulación

La simulación consistió en la solución numérica de las ecuaciones algebraicas que resultan de igualar a cero las funciones de cambio del modelo de Andrietta (ecuaciones 6.2-6.4) para lo cual se empleó una simulación digital en Matlab R2018b con una subrutina que utiliza el método de Newton, en la cual en una primera parte del programa se presenta la inicialización donde se establece el criterio de convergencia, el factor de relajación, y otros parámetros iniciales necesarios para el programa. El bucle principal de iteración viene a continuación, en esta parte, los componentes de la matriz jacobiana se calculan por diferenciación numérica, y nuevas estimaciones de las raíces se calculan. Este proceso continúa hasta que se cumple el criterio de convergencia o se alcance un límite máximo de iteraciones.

De la simulación realizada en Peñaloza (2014), se encontró que existen puntos críticos en función de la concentración de levadura en la corriente de salida para las concentraciones de sustrato y etanol en la corriente de salida, así como también para la velocidad de crecimiento de levadura, con base a esto se efectuó una simulación con el propósito de conocer y observar la tendencia del comportamiento del proceso en función de la concentración de sustrato alimentado, para lo cual se manejaron velocidades de dilución en un intervalo de 0 a 1 1/h, y una concentración de etanol en la entrada de 0-10 g/L. Y así visualizar como son las variables de salida para los puntos críticos en los cuales la concentración de levadura se encuentra alrededor de 52 g/L, y determinar la concentración de azúcar que puede ser convertida en etanol.

6.2.1 Simulación para un tren de cinco reactores

Se realizó una simulación con el objetivo de conocer y observar la tendencia del comportamiento del proceso en función de las variables de entrada, para lo cual se manejaron velocidades de dilución en un intervalo de 0 a 1 1/h, y una concentración de etanol en la entrada de 0-10 g/L. Con alimentaciones de 250 g/L de sustrato y 90 g/L de levadura. Y así visualizar como son las variables de salida, y determinar si una o más de las variables de entrada juegan un papel significativo en el proceso. En la Figura 6.4 se muestran los campos de acción donde todas las variables de entrada son supuestas, cada una de las cajas se supone como un tren de cinco reactores, para ello se realizaron 93 corridas.

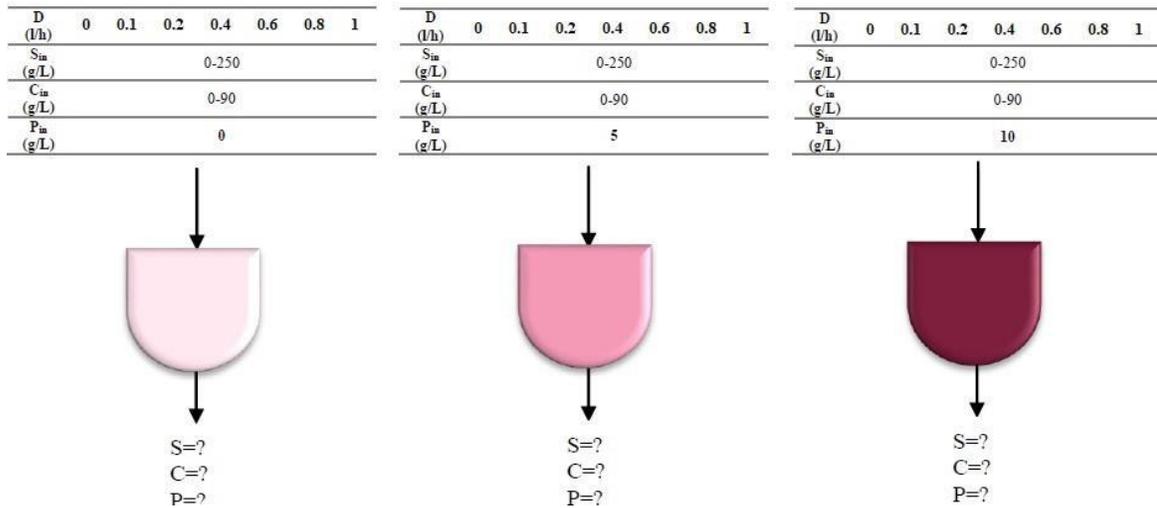


Figura 6.4 Campos de simulación.

Al realizar las simulaciones para el tren de reactores se obtuvo el mismo comportamiento que para el caso de un solo reactor como se observó en Peñaloza (2014), existe un punto crítico cuando la concentración de levadura en la corriente de salida es alrededor de 52 g/L, ya que en este punto es donde se obtienen las más altas concentraciones de etanol y las mínimas concentraciones de sustrato, debido a la gran cantidad de información obtenida de las 93 simulaciones y que en todas se obtuvo la misma tendencia, en la que con bajas velocidades de dilución se obtienen las más elevadas concentraciones de etanol y las menores concentraciones de sustrato no convertido, se procedió a realizar el diseño del tren de biorreactores como se muestra en la siguiente sección.

6.3 Diseño

Para realizar el diseño fue necesario determinar los valores de las variables en la corriente de entrada que proporcionan la mayor concentración de etanol, con el "casi"-total consumo de azúcar, para diferentes concentraciones de etanol alimentado, ya que de la simulación se identificaron los puntos críticos para la concentración de levadura máxima requerida, sustrato alimentado, producción de etanol y levadura en el reactor, para términos de diseño se explorarán los campos de acción mostrados en la Figura 6.5, en los que cada caja se visualiza como un tren de cinco reactores en operación en continuo.

Una vez identificados estos puntos, se realizaron 279 corridas donde se analizó su comportamiento con respecto a la velocidad de dilución como se verá en las siguientes secciones, los resultados mostrados incluyen únicamente el caso donde $P_{in}=0$ g/L

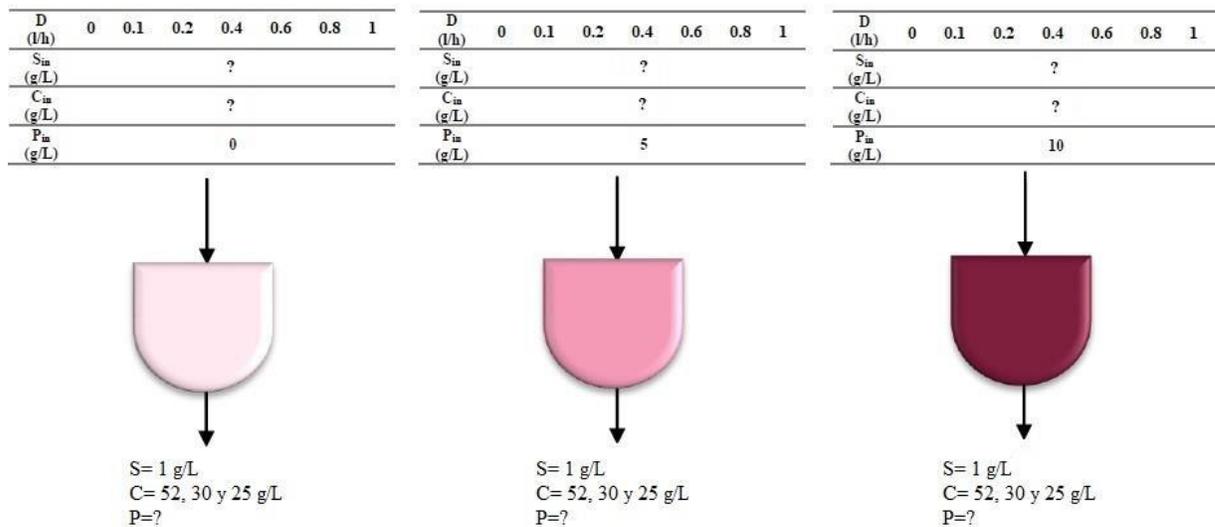


Figura 6.5 Campos de diseño para diferentes valores de C.

6.3.1 Concentración máxima de glucosa en la corriente de entrada

En la Figura 6.6 se muestran los resultados de la concentración requerida de glucosa para alimentar un tren de reactores en operación en continuo para la producción de bioetanol de segunda generación, se puede observar que se tienen tres superficies de respuesta las cuales corresponden a las concentraciones de glucosa en las que se tiene un valor de 52, 30 y 25 g/L de levadura en la corriente de salida, siendo la superficie superior la que corresponde a $C=52$ g/L, la siguiente con $C=30$ g/L y la inferior con $C=25$ g/L. Cabe señalar que no existe una

Fermentación

diferencia significativa entre estas superficies ya que la variación entre ellas es no mayor a 10 g/L, por lo que operar con concentraciones menores a las del punto crítico resulta factible, ya que se tendría una operación más sencilla del proceso cuando se manejaran valores de 30 y 25 g/L de levadura en el tren de reactores.

Si se observa el comportamiento de la glucosa con respecto a la velocidad de dilución, la mayor concentración corresponde a la operación en lote ($D=0$ 1/h), y con el incremento de la velocidad de dilución también se tiene una disminución en la concentración de glucosa que puede ser alimentada, por lo que la relación entre estas es inversamente proporcional.

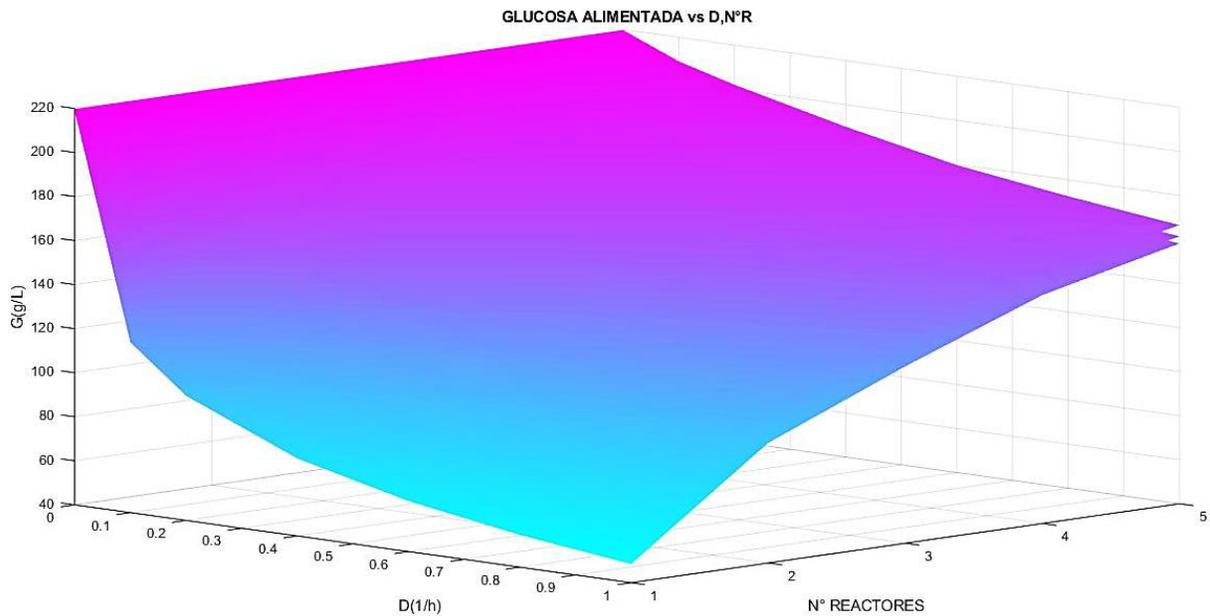


Figura 6.6 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de sustrato que puede ser alimentado a un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.

Sin embargo, con el aumento del número de reactores es cada vez menos significativa, acercándose a mucho a la concentración de glucosa en lote cuando se opera a velocidades de dilución bajas, por lo que operar con un tren de reactores podría ser equiparable con la operación en lote.

Es posible notar que el mayor aumento de la concentración de glucosa se tiene en el segundo, tercer y cuarto reactor, cuando se aumenta a un quinto reactor el aumento es poco significativo, como se puede observar en la Tabla 6.1 es por esta razón que en este trabajo se trabajó únicamente hasta cinco reactores, ya que al observar este comportamiento se deduce que no se tendrá un incremento significativo de la concentración con más reactores, lo cual es económicamente inviable.

Fermentación

Tabla 6.1 Concentración de glucosa en la entrada con $C=52, 30$ y 25 g/L y $P_{in}=0$ g/L.

Glucosa para C=52 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	219.7270	126.6150	106.6000	85.3360	72.8240	64.1420	57.6180
2	219.7270	172.3442	155.8479	136.1707	123.2828	113.6215	105.8944
3	219.7270	189.6483	176.1565	159.1905	147.5373	138.5008	131.0755
4	219.7270	201.4639	192.0001	177.1641	167.3534	159.5388	152.9759
5	219.7270	209.0847	202.0000	190.0000	179.6559	172.5691	166.5262
Glucosa para C=30 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	218.8280	120.7510	100.2680	78.8570	66.4790	58.0260	51.7320
2	218.8280	167.8463	150.4164	129.8214	116.4734	106.5549	98.6786
3	218.8280	186.2068	171.8075	153.8189	141.5498	132.0866	124.3542
4	218.8280	198.9288	189.5000	172.9258	162.4939	154.2106	147.2791
5	218.8280	207.0678	200.0000	186.2500	175.4487	167.8735	161.4310
Glucosa para C=25 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	218.8230	117.3080	96.5840	75.1500	62.8980	54.6100	48.4760
2	218.8230	165.1238	147.1464	126.0380	112.4555	102.4035	94.4668
3	218.8230	184.0739	169.1177	150.5135	137.8818	128.1864	120.2772
4	218.8230	197.3243	187.1994	170.2469	159.4251	150.8627	143.7013
5	218.8230	205.7731	197.9999	184.0002	172.7324	164.8462	158.1537

Tomando como base que la concentración de etanol obtenida a partir de la operación en lote sea el 100% de lo que pueda obtener, se calcularon los porcentajes de etanol para los reactores en continuo a las diferentes velocidades de dilución, después se calculó la diferencia de porcentajes entre el reactor 2 y reactor 1 (ΔR_{2-1}), reactor 3 y reactor 2 (ΔR_{3-2}), reactor 4 y reactor 3 (ΔR_{4-3}), reactor 5 y reactor 4 (ΔR_{5-4}), esto para determinar que tanto se incrementaba el porcentaje de etanol al aumentar la cantidad de reactores y determinar la conveniencia de seguir extendiendo dicha cantidad.

Como se puede apreciar en la Figura 6.7, en donde se tomó como caso particular de análisis etanol obtenido a partir de una carga de 10% p/v de BCA, con 60 FPU para la hidrólisis enzimática a diferentes velocidades de dilución, al aumentar la cantidad de reactores la diferencia de los porcentajes de etanol obtenidos es cada vez menor llegando a ser menos de 2% para la ΔR_{4-3} y ΔR_{5-4} , por lo que agregar un sexto reactor resultaría poco factible ya que el incremento del porcentaje de etanol sería mínimo, este comportamiento ocurre también para el PCA.

Fermentación

Porcentaje de Etanol vs Delta de reactores, Velocidad de dilución

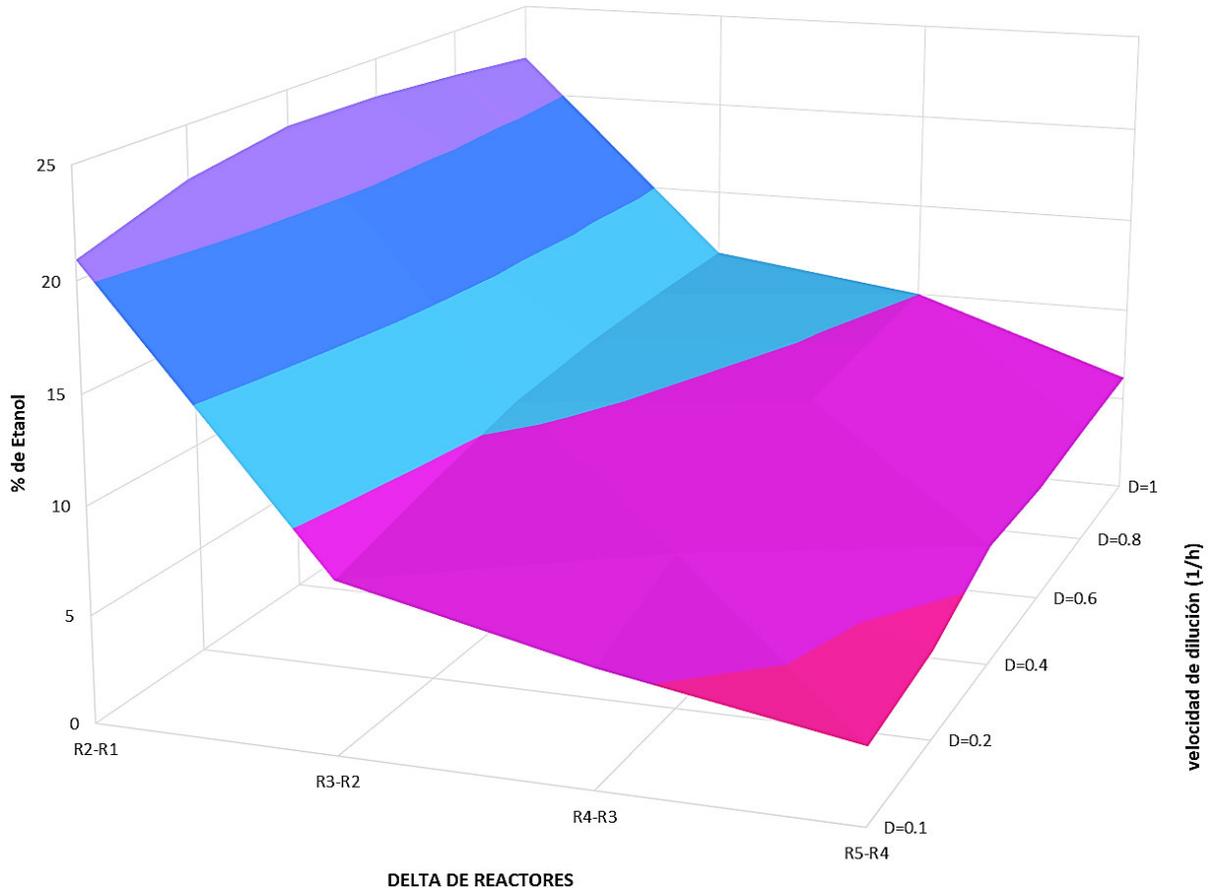


Figura 6.7 Resultados de la diferencia de porcentaje de glucosa obtenida a partir de BCA entre reactores con una carga de 10% p/v de sólidos, 60 FPU con $D=0.1-1$ 1/h.

6.3.2 Concentración máxima de etanol en la corriente de salida

De la Figura 6.8 donde se muestran los resultados de la concentración de etanol que puede ser producida en un tren de cinco reactores, se puede notar que se tiene el mismo comportamiento que con la concentración de glucosa, por lo que estas concentraciones son homologas. Igualmente que, con el caso de la glucosa, se puede observar que no existe una diferencia significativa entre las superficies ya que esta varía alrededor de 10 g/L entre $C=52$ y $C=25$ g/L, por lo que con esto se reafirma que la opción de emplear concentraciones de levadura menores a las del punto crítico es factible tanto económica como operacionalmente.

Fermentación

En relación con las velocidades de dilución, se puede observar que las mayores concentraciones de etanol se obtienen al emplear velocidades de dilución bajas.

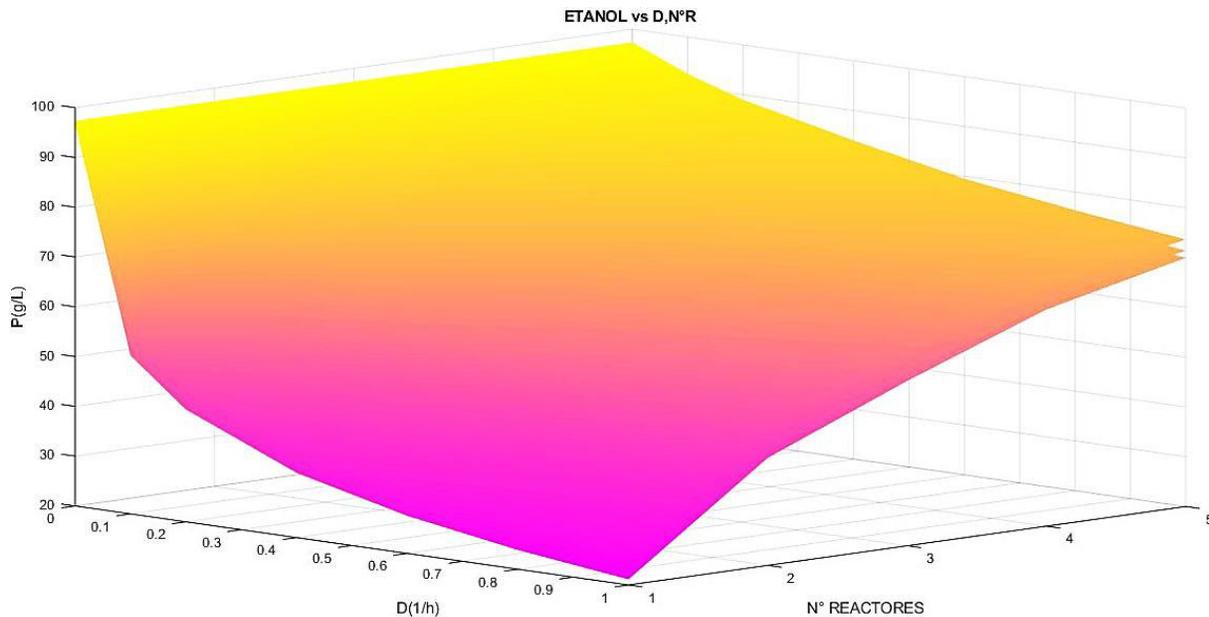


Figura 6.8 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de etanol que puede ser producido de un tren de reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.

Con respecto al aumento de número de reactores en el tren, se puede observar que la concentración de etanol aumenta, haciendo también menos significativo el aumento de la velocidad de dilución, llegando a acercarse a la concentración de etanol cuando se opera en lote, es decir con una velocidad de dilución cero, además de que para obtener altas productividades con una operación en lote el tiempo y volumen del reactor también debe ser alto, y con una operación en continuo a través de un tren de reactores y operando con el mismo tiempo que la operación en lote, esta productividad puede igualarse y superarse ya que con las concentraciones obtenidas de etanol se acercan significativamente a la de la operación en lote, como se puede apreciar en la Tabla 6.2.

Por consiguiente, si bien la velocidad de dilución juega en un papel determinante para el diseño de los reactores, ya que conforme esta aumente es posible obtener mayores productividades de etanol ya que los flujos serían más grandes pero el tiempo de residencia en los reactores sería menor, esto puede resultar contraproducente ya que este se encontrará muy diluido lo cual impactaría en los costos de separación, por lo que acorde a las necesidades de producción como tiempos y volúmenes de reactores, se podrá elegir la velocidad de dilución y cantidad de reactores con los que se obtengan los mejores resultados.

Fermentación

Tabla 6.2 Concentración de etanol en la salida con $C=52, 30$ y 25 g/L y $P_{in}=0$ g/L.

Etanol (g/L) para C=52 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	97.3330	55.8980	46.9920	37.5290	31.9610	28.0980	25.1950
2	97.3330	76.2480	68.9072	60.1508	54.4157	50.1164	46.6779
3	97.3330	83.9483	77.9444	70.3946	65.2090	61.1877	57.8835
4	97.3330	89.2062	85.0000	78.3928	74.0271	70.5496	67.6291
5	97.3330	92.5974	89.0000	84.0000	79.5017	76.3481	73.6590
Etanol (g/L) para C=30 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	96.9345	53.3092	44.2007	34.6797	29.1763	25.4188	22.6212
2	96.9345	74.2580	66.5056	57.3461	51.4101	46.9995	43.4972
3	96.9345	82.4249	76.0201	68.0192	62.5626	58.3540	54.9153
4	96.9345	88.0838	83.8934	76.5174	71.8775	68.1934	65.1106
5	96.9345	91.7041	88.1187	82.3421	77.6399	74.2706	71.4052
Etanol (g/L) para C=25 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	96.6910	51.7570	42.5350	32.9970	27.5450	23.8560	21.1270
2	96.6910	73.0349	65.0350	55.6417	49.5976	45.1244	41.5926
3	96.6910	81.4677	74.8122	66.5333	60.9122	56.5978	53.0782
4	96.6910	87.3641	82.9997	75.3147	70.4990	66.6887	63.5019
5	96.6910	91.1238	87.7499	81.5001	76.4207	72.9113	69.9332

6.3.3 Concentración máxima de levadura en la corriente de entrada

En la Figura 6.9 se muestran las superficies de respuesta obtenidas para la concentración de levadura cuando se tiene $C=52, 30$ y 25 g/L en la corriente de salida, donde se puede apreciar que superficies obtenidas forman mallas casi planas. Es posible notar que existe una separación entre las superficies debido a la especificación de obtener 52, 30 y 25 g/L de levadura en la corriente de salida, por lo que los valores de las concentraciones de levadura en la corriente de entrada se encuentran un poco por debajo de la especificación como se puede observar en la Tabla 6.3.

Fermentación

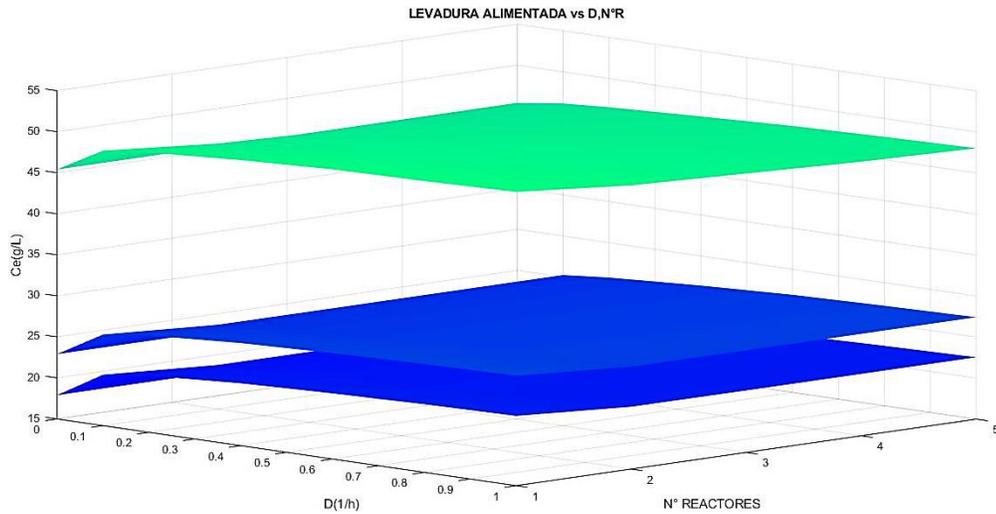


Figura 6.9 Superficie de respuesta para la máxima de concentración de levadura que puede ser alimentada a un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.

Tabla 6.3 Concentración de levadura en la entrada con $C=52, 30$ y 25 g/L y $P_{in}=0$ g/L.

Levadura (g/L) para C=52 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	45.4000	48.5000	49.1000	49.8000	50.3000	50.5000	50.8000
2	45.4000	47.3500	47.9200	48.5900	49.0100	49.3300	49.5700
3	45.4000	46.8700	47.3900	48.0200	48.4300	48.7400	48.9900
4	45.4000	46.4700	46.8500	47.4900	47.8700	48.1600	48.4000
5	45.4000	46.1400	46.5000	47.0000	47.4700	47.7700	48.0100
Levadura (g/L) para C=30 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	22.9000	26.1000	26.8000	27.5000	27.9000	28.2000	28.4000
2	22.9000	25.2700	25.8700	26.5300	26.9400	27.2400	27.4700
3	22.9000	25.2500	25.8400	26.5000	26.9100	27.2000	27.4300
4	22.9000	25.2500	25.8000	26.4900	26.9000	27.1900	27.4200
5	22.9000	25.2400	25.7500	26.4000	26.9000	27.1900	27.4200
Levadura (g/L) para C=25 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	17.9000	21.2000	21.9000	22.6000	23.0000	23.3000	23.5000
2	17.9000	20.3700	20.9800	21.6500	22.0700	22.3600	22.5900
3	17.9000	20.3500	20.9500	21.6200	22.0300	22.3300	22.5500
4	17.9000	20.3400	20.9000	21.6100	22.0200	22.3200	22.5400
5	17.9000	20.3400	20.8500	21.5200	22.0200	22.3100	22.5400

6.3.4 Velocidad de crecimiento de levadura

En la Figura 6.10 se obtuvieron las superficies de respuesta correspondientes para la velocidad de crecimiento de levadura para $C=52, 30$ y 25 g/L. Se puede observar que se presenta una tendencia inversa a la concentración de glucosa en la corriente de entrada y la concentración de etanol, ya que se tiene un comportamiento creciente cuando se aumenta la velocidad de dilución. En lo que concierne a la cantidad de reactores, con el aumento de este e tiene una disminución bastante significativa de la velocidad de crecimiento de levadura, ya que al tener cinco reactores dicha velocidad se encuentra muy cercana a cero acercándose considerablemente a velocidad de crecimiento de levadura de la operación en lote esto se puede observar en la Tabla 6.4.

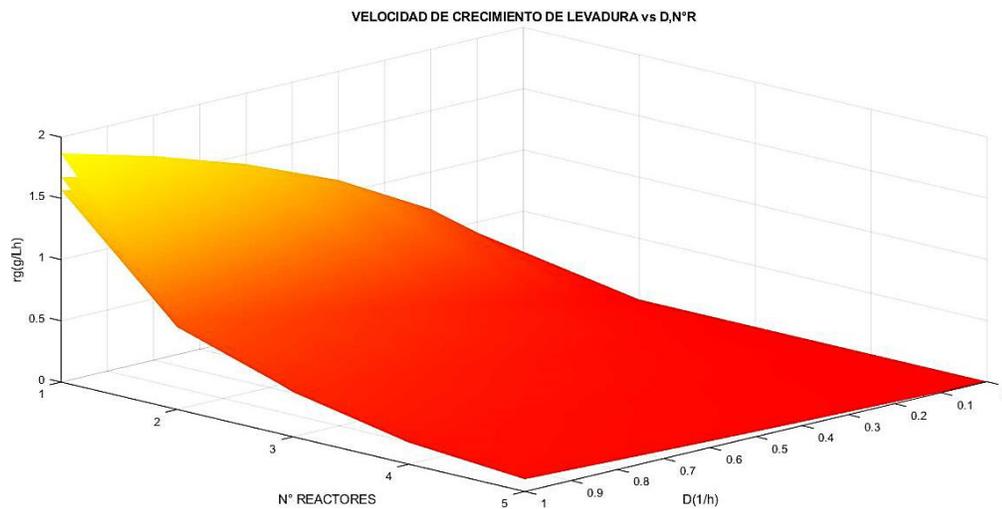


Figura 6.10 Superficie de respuesta para la velocidad de crecimiento de levadura de un tren de cinco reactores con $C=52, 30$ y 25 g/L, con velocidades de dilución de $0-1$ 1/h.

Tabla 6.4 Velocidad de crecimiento de levadura con $C=52, 30$ y 25 g/L y $P_{in}=0$ g/L.

Velocidad de crecimiento de levadura (g/Lh) para $C=52$ g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	0.0010	0.4150	0.6970	1.1130	1.4220	1.6670	1.8680
2	0.0010	0.0759	0.1572	0.3121	0.4549	0.5867	0.7087
3	0.0010	0.0274	0.0624	0.1375	0.2141	0.2899	0.3642
4	0.0010	0.0104	0.0260	0.0591	0.0965	0.1355	0.1755
5	0.0010	0.0045	0.0130	0.0310	0.0515	0.0751	0.1002
Velocidad de crecimiento de levadura (g/Lh) para $C=30$ g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1

Fermentación

1	0.0010	0.3950	0.6550	1.0280	1.2960	1.5050	1.6740
2	0.0010	0.0776	0.1589	0.3110	0.4485	0.5734	0.6875
3	0.0010	0.0288	0.0650	0.1419	0.2193	0.2950	0.3684
4	0.0010	0.0111	0.0278	0.0623	0.1012	0.1416	0.1827
5	0.0010	0.0048	0.0140	0.0350	0.0549	0.0798	0.1062
Velocidad de crecimiento de levadura (g/Lh) para C=25 g/L							
R/D	0	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1
1	0.0010	0.3840	0.6310	0.9790	1.2260	1.4150	1.5670
2	0.0010	0.0783	0.1594	0.3091	0.4429	0.5632	0.6721
3	0.0010	0.0295	0.0664	0.1440	0.2214	0.2965	0.3689
4	0.0010	0.0114	0.0280	0.0640	0.1037	0.1447	0.1862
5	0.0010	0.0050	0.0140	0.0340	0.0569	0.0826	0.1096

Por lo tanto, para tener una alta concentración de etanol en la corriente de salida del tren de reactores y un consumo casi total de glucosa, es necesario operar con velocidades de crecimiento de levaduras bajas resultado de velocidades de dilución bajas con un número alto de reactores en el tren.

6.3.5 Fracción etanol/agua con BCA y PCA

En las Figuras 6.11 y 6.12 se muestran los resultados de la fracción de etanol/agua obtenidos a partir de BCA y PCA en la corriente de salida del tren de reactores, esto para cada uno de los 980 escenarios planteados en la sección 5.3 cuando se tiene $C=52$ g/L. En cada una de las 20 gráficas mostradas por figura, se tienen siete superficies correspondientes a los valores de fracción etanol/agua a partir de sacarificaciones efectuadas con 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU de complejo enzimático, estas no se pueden distinguir y se ven como una sola superficie por lo que la fracción es prácticamente la misma para todos los casos.

La tendencia de esta fracción resulta bastante familiar, ya que es la misma que para la concentración de glucosa y etanol, la mayor fracción se obtiene en la operación en lote cuando la velocidad de dilución es cero, y aunque pareciera existir una diferencia un tanto significativa cuando la operación en continuo se lleva a cabo, si se observa la escala se podrá notar que esta diferencia es de milésimas de fracción cuando se opera a velocidades de dilución bajas con un alto número de reactores, y que al operar con velocidades de dilución altas y un mayor número de reactores dicha diferencia es de centésimas de fracción.

Fermentación

Es por ello que los resultados mostrados en estas gráficas concluyen que la operación en continuo es equiparable a la clásica operación en lote, ya que al tener fracciones etanol/agua sumamente similares, los costos de separación también lo serán, pero como se hizo mención anteriormente si se opera en continuo tomando el mismo tiempo que llevaría a cabo realizar la operación en lote la producción será igualada e inclusive superada. Por lo que se refiere a las biomazas empleadas BCA y PCA, la mayor fracción se obtiene a partir del BCA con una diferencia de ocho décimas de fracción con respecto al PCA, lo cual resulta lógico ya que el BCA tiene una mayor cantidad de celulosa que da una mayor concentración de glucosa y por ende es menor la concentración de agua que se obtuvo al final de la evaporación, permitiendo así que la fracción de etanol/agua sea menor.

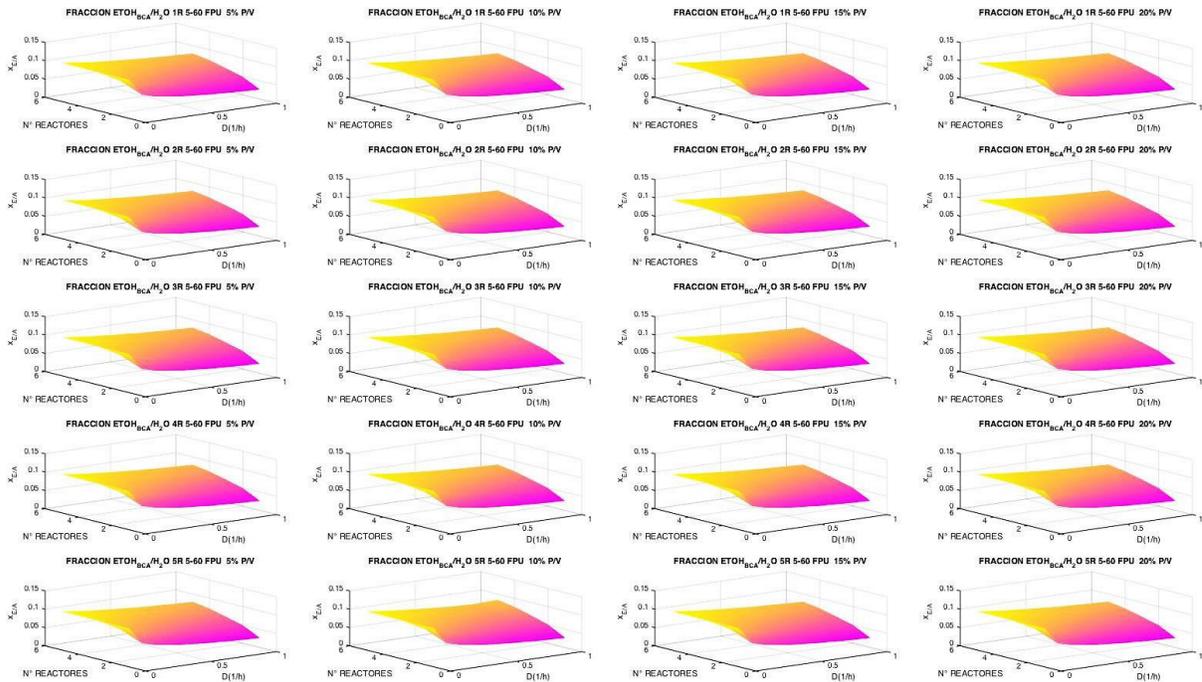


Figura 6.11 Superficie de respuesta para la fracción etanol/agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0- 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo con $C=52$ g/L.

Fermentación

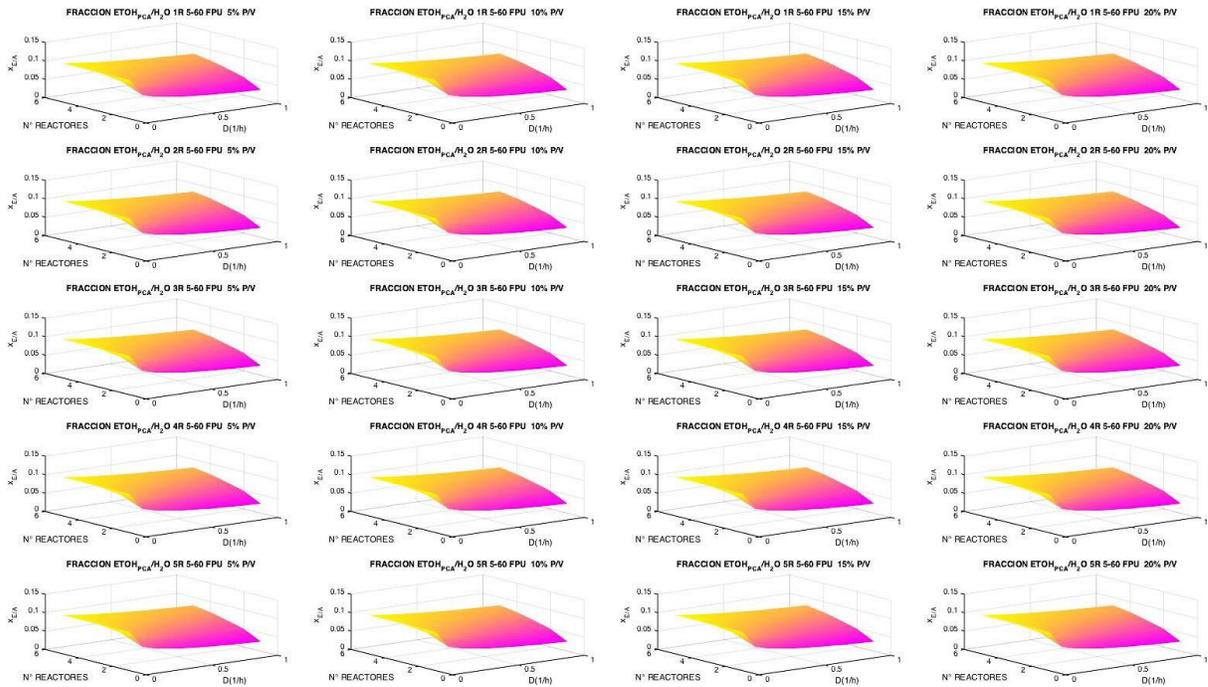


Figura 6.12 Superficie de respuesta para la fracción etanol/agua obtenidas para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0- 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo con $C=52$ g/L.

6.4 Validación de los resultados obtenidos por optimización con algoritmos genéticos

Siendo una de las finalidades de este trabajo, comprobar la efectividad del “Brutish Scanning”, se realizó una validación de los resultados obtenidos de la etapa de fermentación, ya que como se pudo observar es únicamente en esta etapa donde se obtienen puntos críticos, dicha validación se realizó haciendo uso de la técnica de optimización de algoritmos genéticos mediante el uso de la herramienta “Optimization tool” de Matlab, ya que este es un método para solucionar problemas de optimización con o sin restricciones basándose en un proceso de selección natural que imita la evolución biológica. Este algoritmo modifica repetidamente una población de soluciones individuales. En cada paso, el algoritmo genético selecciona individuos de la población actual aleatoriamente y los utiliza como padres para producir los hijos de la siguiente generación. Tras varias generaciones sucesivas, la población “evoluciona” hacia una solución óptima.

6.4.1 Escenarios de optimización, declaración de función objetivo y variables manipulables

Como se vio en las secciones anteriores, los principales objetivos del estudio de la etapa de fermentación fueron obtener primeramente la más alta concentración de etanol, y después de ello obtener de igual manera la concentración más alta de etanol alimentando cierta concentración de glucosa que fuera consumida casi totalmente. Es por ello, que de estas dos necesidades surgen dos escenarios de optimización como se muestran a continuación:

- *Primer escenario de optimización:* ya que inicialmente se busca obtener una máxima concentración de etanol, se llevará a cabo una optimización mono objetivo, teniendo como función objetivo la maximización de la concentración de etanol en cada uno de los reactores a las diferentes velocidades de dilución, teniendo como variables manipulables la concentración de glucosa y levadura, y como restricción que la concentración de etanol no sobrepase los 103g/L, ya que a esta concentración se da la inhibición por producto causando la muerte celular.
- *Segundo escenario de optimización:* en este se busca obtener una máxima concentración de etanol con un consumo casi total de la glucosa alimentada, por lo que se llevará a cabo una optimización multiobjetivo, teniendo como funciones objetivo la maximización de la concentración de etanol y la minimización de la concentración de glucosa, ambas en la corriente de salida en cada uno de los reactores a las diferentes velocidades de dilución, teniendo como variables manipulables la concentración de glucosa y levadura, y como restricción que la concentración de etanol no sobrepase los 103 g/L.

6.4.2 Optimización mono objetivo para maximización de producción de bioetanol

Para llevar a cabo la optimización mono objetivo se empleó una población de 400 individuos, 200 generaciones y 200 generaciones de paro.

La función fitness es la función que desea optimizar, en este caso la maximización de la concentración de etanol, para algoritmos de optimización estándar, esto se conoce como la función objetivo. El software de la caja de herramientas intenta encontrar el mínimo de la función fitness, es por esto que fue necesario multiplicar la función fitness por una unidad negativa para poder realizar la maximización.

Fermentación

Un individuo es cualquier punto en el que puede aplicar la función fitness. El valor de la función de aptitud para un individuo es su puntaje, en este caso los individuos son los valores de las concentraciones de levadura y glucosa.

Por lo general, el mejor valor mejora rápidamente en las primeras generaciones, cuando los individuos están más lejos de lo óptimo. El mejor valor mejora más lentamente en las generaciones posteriores, cuyas poblaciones están más cerca del punto óptimo.

A continuación, se mostrarán los resultados obtenidos para el caso de un reactor en lote y para un reactor de operación en continuo con velocidad de dilución de 0.1 1/h cuando $P_{in}=0$ g/L en la Figura 6.13, teniendo dos variables a optimizar, siendo estas la concentración de levadura y sustrato en la corriente de entrada, teniendo como restricción que $0 < C_{in} < 90$ y $0 < S_{in} < 232$, especificando así que “Optimization tool” debía operar en intervalos de [0, 90] y [0, 232], ya que las máximas concentraciones de levadura y sustrato que se pueden alimentar corresponden a 90 y 232 g/L respectivamente.

Se puede apreciar que en cada figura se tienen dos gráficas, la primera es llamada “Best fitness” y traza el mejor valor de puntaje y puntaje promedio versus generación, en este caso “fitness value” corresponde al valor de la concentración de etanol y “Generation” corresponde a la generación en la que se van obteniendo los fitness.

La gráfica “Current Best Individual” traza las entradas de vector del individuo con el mejor valor de función en cada generación, es decir proporciona los mejores valores de las variables manipulables, en este caso la variable “1” corresponde a la concentración de levadura y la variable “2” corresponde a la concentración de glucosa ambas para la corriente de entrada.

En la Figura 6.13a se puede observar en la gráfica “Best fitness” que el mejor valor para la concentración de etanol es de 98.6563 g/L, coincidiendo con la media, logrando estabilizarse alrededor de la quinta generación. En la gráfica “Current Best Individual” se puede notar que la concentración de levadura en la corriente de entrada corresponde a un valor cercano a los 48 g/L y que para la glucosa concierne a un valor aproximado a los 232 g/L.

En la Figura 6.13b se puede apreciar que en la gráfica “Best fitness” el mejor valor para la concentración de etanol es de 66.4762 g/L, coincidiendo igualmente con la media, logrando estabilizarse alrededor de la quinta generación. En la gráfica “Current Best Individual” se puede observar que el valor de la concentración de levadura en la corriente de entrada se aproxima a los 49 g/L y que para la glucosa corresponde a un valor aproximado a los 232 g/L.

Los valores de las concentraciones de levadura son muy similares a los obtenidos en la sección 6.3.3, sin embargo los valores de las concentraciones de glucosa en la corriente de entrada no son tan cercanos a los obtenidos en la sección 6.3.1, ya que el máximo valor para la operación

Fermentación

en lote es de 219.7269 g/L y 126.6092 g/L para la operación en continuo con $D=0.11/h$, esta tendencia se repitió para el resto del intervalo de las velocidades de dilución, ya que lo único que se está buscando es obtener la máxima concentración de etanol, y está será siempre obtenida al alimentar la máxima concentración de glucosa que puede ser convertida sin que exista inhibición por sustrato y producto, ya que es a esta concentración de glucosa donde se obtiene la máxima concentración de etanol, pero como puede observarse en el caso de la Figura 6.13b, esta glucosa no fue consumida en su totalidad ya que la concentración de etanol se encuentra muy por debajo de la obtenida en el lote, esto por la diferencia del tamaño de flujo que pasa por el reactor.

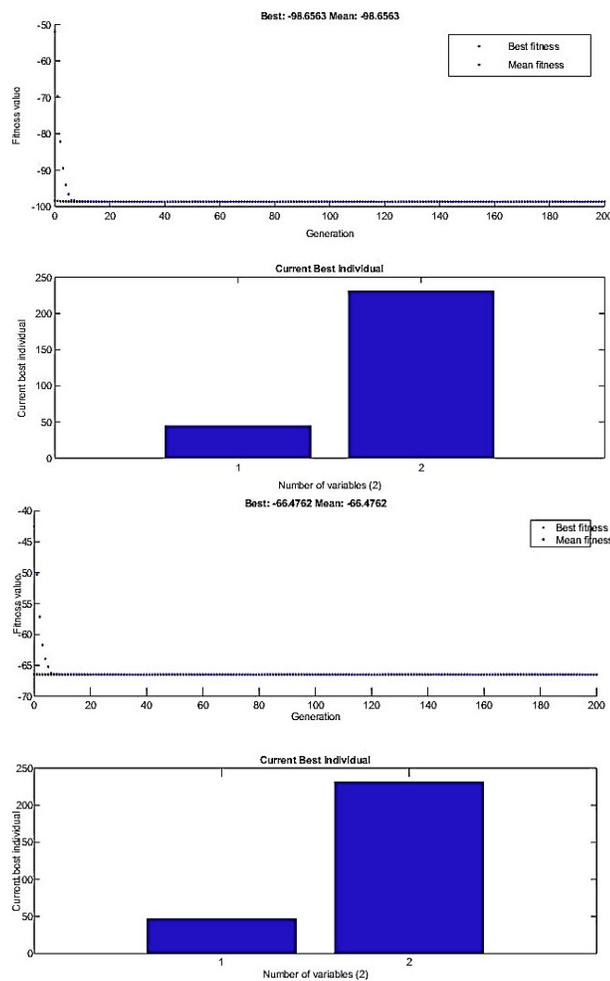


Figura 6.13 Gráficas de optimización mono objetivo para la maximización de la concentración de etanol para un reactor con operación en lote (a) y para un reactor con operación en continuo con $D=0.11/h$ (b).

6.4.3 Optimización multiobjetivo para maximización de producción de bioetanol y consumo casi total de sustrato (minimización)

Como se mencionó en la sección 6.3.1 se tienen dos funciones objetivo que se desean optimizar simultáneamente, para ellos se hizo uso de la herramienta “gamultiobj” de Matlab, estos solucionadores encuentran las compensaciones óptimas entre las funciones objetivas competidoras mediante un frente de Pareto de múltiples funciones de fitness utilizando un algoritmo genético, en este caso las funciones fitness corresponden a la maximización de la concentración de etanol y a la minimización de glucosa, ambas en la corriente de salida.

En la Figura 6.14 se presentan los frentes de Pareto obtenidos para una operación en lote y para un tren de cinco reactores con $D=0.1$ 1/h respectivamente, “Objective 1” corresponde a la concentración de etanol en la corriente de salida, estos valores son negativos ya que “gamultiobj” busca minimizar, por lo que nuevamente se multiplico la función fitness por una unidad negativa, “Objective 2” corresponde a la concentración de glucosa en la corriente de salida, como restricciones se tuvieron $0 < C_{in} < 90$ y $0 < S_{in} < 232$, ya que como se había mencionado anteriormente estas son las máximas concentraciones de levadura y sustrato que se pueden alimentar al reactor.

En la Figura 6.13a se puede observar que cuando la concentración de glucosa es igual 1 g/L, la concentración de etanol es de 97.33 g/L, lo cual coincide con los valores de la sección 6.3.2, los cuales corresponden a 219.707666 g/L de glucosa alimentada y 42.3504476 g/L de levadura en la corriente de entrada.

En la Figura 6.14b se muestra el frente de Pareto para un tren de cinco reactores con una velocidad de dilución de 0.1/h, es posible notar que cuando la concentración de glucosa es 1 g/L la concentración de etanol es de 90.0979446 g/L, con valores de 203.467383 y 46.3453691 g/L de glucosa y levadura respectivamente, acercándose mucho a los valores obtenidos en las secciones 6.3.1, 6.3.2 y 6.3.3.

Fermentación

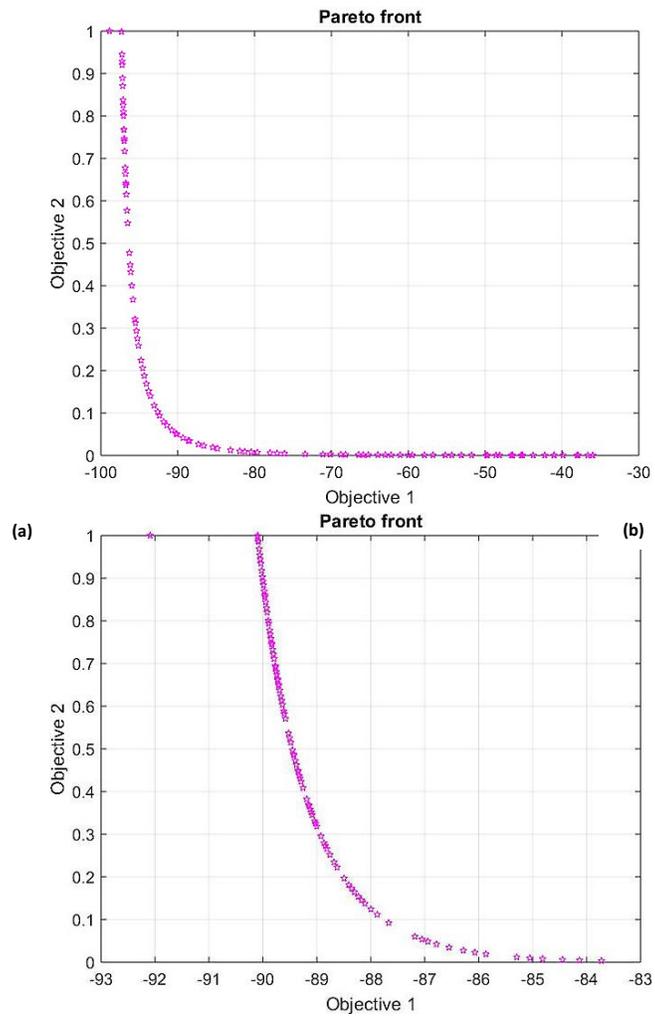


Figura 6.14 Frente de Pareto para la maximización de la concentración de etanol y minimización de la concentración de glucosa en la corriente de salida para un reactor con operación en lote (a) y para un reactor con operación en continuo con $D=0.1$ 1/h (b).

Por lo tanto, los resultados obtenidos al emplear la técnica “Brutish Scanning” fueron validados exitosamente al coincidir con los obtenidos por la optimización por “Algoritmos genéticos”, teniendo a favor que al haber empleado la técnica elaborada por los autores se pudo obtener una visualización completa del comportamiento del proceso, y en cambio, al usar técnicas de optimización como la empleada en el presente trabajo si bien se tiene siempre el óptimo, no es posible visualizar todo el campo de opciones en las que se puede operar.

6.5 Comparación de la productividad de etanol para operación de un reactor en lote y continuo.

La productividad de bioetanol en fermentación en lote y continua puede ser comparada bajo las mismas condiciones donde $S_{in} \gg k_S$.

Donde S_{in} es la concentración de sustrato en la corriente de entrada de un solo reactor, si se asume que la productividad en lote está determinada por el volumen del reactor y la concentración final de etanol producido se tiene:

$$P_{LOTE} = V_{LOTE} * P_f \quad (6.10)$$

Donde V_{LOTE} es el volumen del reactor (L) y P_f es la concentración final de etanol producido (g/L), la cual está definida por:

$$P_f^{C^*} = Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*}) \quad (6.11)$$

Como se mencionó anteriormente $Y_{P/S}$ es el coeficiente de rendimiento producto sustrato el cual tiene un valor de 0.445 para el caso de dicha fermentación. $S_{in}^{C^*}$ y S^{C^*} son las concentraciones de sustrato iniciales y finales respectivamente dadas en g/L a cierta concentración de levadura C . Con lo que sustituyendo el valor del coeficiente de rendimiento en la ecuación (6.10) y (6.11) se obtiene:

$$P_{LOTE} = V_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\} \quad (6.12)$$

En el caso de la productividad de la fermentación en continuo, esta está determinada por el volumen del reactor, la velocidad de dilución y por el tiempo total en lote, como se muestra en la ecuación (6.13).

$$P_{CSTR} = V_{CSTR} * D * P_f^{C^*D^*} * t_{LOTE} \quad (6.13)$$

Donde V_{CSTR} es el volumen del reactor (L), D es la velocidad de dilución (1/h), t_{LOTE} es el tiempo total en lote (h) que está dado por la suma de t_B (tiempo en el que el proceso en lote para) y t_R (tiempo en el que el reactor es cargado y descargado) y $P_f^{C^*D^*}$ es la concentración final de etanol producido (g/L) dada a cierta D y a cierta concentración de levadura C , la cual está definida por:

Fermentación

$$P_f^{C^*D^*} = Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*}) \quad (6.14)$$

Donde P_{SS} es la concentración de etanol producido en estado estacionario (g/L) y dado que el coeficiente de rendimiento producto sustrato es el mismo, la ecuación (6.13) tomaría la forma:

$$P_{CSTR} = V_{CSTR} * D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\} \quad (6.15)$$

Comparando las productividades de ambos reactores es posible obtener la siguiente relación:

$$\frac{CSTR}{Lote} = \frac{P_{CSTR}}{P_{LOTE}} = \frac{V_{CSTR} * D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}}{V_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\}} \quad (6.16)$$

Si $V_{LOTE} = V_{CSTR}$ se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{P_{CSTR}}{P_{LOTE}} = \frac{D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}}{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})} \quad (6.17a)$$

Si $V_{LOTE} \neq V_{CSTR}$ se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{P_{CSTR}}{P_{LOTE}} = \frac{V_{CSTR} * D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}}{V_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\}} \quad (6.17b)$$

Haciendo:

$$\frac{P_{CSTR}}{P_{LOTE}} = \eta \quad (6.18)$$

La relación entre los volúmenes de los reactores quedaría determinada por:

$$\eta = \frac{V_{CSTR} * D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}}{V_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\}}$$

Fermentación

$$V_{CSTR} = \frac{\eta * V_{LOTE} * \{Y_{P/S}(S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\}}{D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S}(S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}} \quad (6.19a)$$

$$V_{LOTE} = \frac{V_{CSTR} * D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S}(S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\}}{\eta * \{Y_{P/S}(S_{in}^{C^*} - S^{C^*})\}} \quad (6.19b)$$

Cabe destacar que las concentraciones iniciales de sustrato para el caso del biorreactor en continuo están determinadas por la velocidad de dilución que se maneje en el reactor, y que para los dos reactores se busca un consumo casi total de sustrato por lo que $S_f \leq 1$.

De los resultados del trabajo de maestría se obtuvieron las siguientes tablas con los valores de las concentraciones de alimentación de sustrato y levadura para los casos en los que se alimentan 0, 5 y 10 g/L de etanol en la concentración inicial, y para obtener concentraciones de 52, 30 y 25 g/L de levadura dentro del reactor. Como se muestra a continuación:

Tabla 6.5 Concentraciones de sustrato para diferentes C y Pin

S_{in} (g/L) para C=52 g/L								
D(1/h)/ P_{in} (g/L)	0.0001	0.1	0.2	0.4	0.42	0.6	0.8	1
0	219.7270	126.6150	106.6000	85.3360	83.8230	72.8240	64.1420	57.6180
5	208.7900	117.8890	98.6180	78.3070	76.8690	66.4540	58.2830	52.1750
10	197.6980	109.2610	90.7630	70.0770	71.4370	60.2610	52.6120	46.9270
S_{in} (g/L) para C=30 g/L								
0	218.8280	120.7510	100.2680	78.8570	77.3200	66.4790	58.0260	51.7320
5	207.8200	112.2400	92.5170	72.1460	70.7530	60.4790	52.5670	46.6560
10	196.8290	103.8370	84.9660	64.2970	65.6080	54.6670	47.2530	41.8380
S_{in} (g/L) para C=25 g/L								
0	218.8230	117.3080	96.5840	75.1500	73.6980	62.8980	54.6100	48.4760
5	207.2820	108.9310	88.9860	69.6390	67.2690	57.1230	49.3890	43.6290
10	196.3030	100.6650	81.6180	61.0230	62.3080	51.5420	44.2990	39.0590

Tabla 6.6 Concentraciones de levadura para diferentes C y Pin

C_{in} (g/L) para C=52 g/L								
D(1/h)/ P_{in} (g/L)	0.0001	0.1	0.2	0.4	0.42	0.6	0.8	1
0	45.4000	48.5000	49.1000	49.8000	49.9000	50.3000	50.5000	50.8000
5	45.8000	48.8000	49.4000	50.1000	50.1000	50.5000	50.7000	50.9000
10	46.1000	49.1000	49.7000	50.4000	50.3000	50.7000	50.9000	51.1000
C_{in} (g/L) para C=30 g/L								
0	22.9000	26.1000	26.8000	27.5000	27.5000	27.9000	28.2000	28.4000
5	23.2000	26.4000	27.0000	27.7000	27.8000	28.1000	28.4000	28.5000
10	23.6000	26.7000	27.3000	28.0000	27.9000	28.3000	28.5000	28.7000
C_{in} (g/L) para C=25 g/L								

Fermentación

0	17.9000	21.2000	21.9000	22.6000	22.7000	23.0000	23.3000	23.5000
5	18.2000	21.5000	22.1000	22.8000	22.9000	23.2000	23.5000	23.6000
10	18.6000	21.8000	22.4000	23.1000	23.0000	23.4000	23.6000	23.8000

Se emplearon los valores de sustrato y levadura para la velocidad de dilución de 0.0001 para realizar simulaciones dinámicas y obtener el tiempo en lote, para los casos de alimentaciones de alcohol de 0, 5 y 10, y para las concentraciones de levadura correspondientes, realizándose así nueve simulaciones:

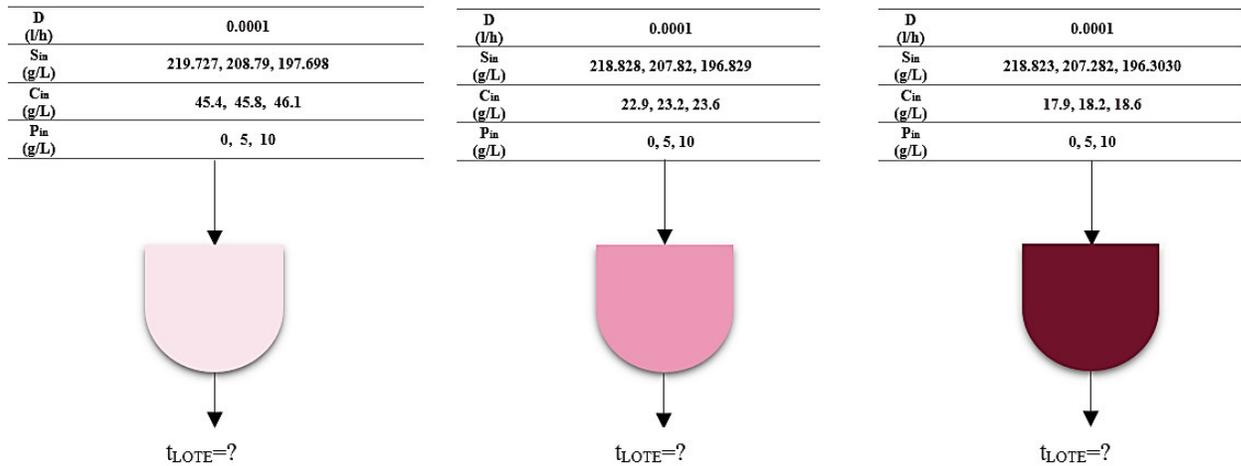


Figura 6.15 Campos de búsqueda para reactor en lote

Con lo que se obtuvieron los siguientes tiempos:

Tabla 6.7 Tiempos de reacción para diferentes C y P_{in}

C (g/L)	t(h)		
	P _{in} =0 g/L	P _{in} =5 g/L	P _{in} =10 g/L
52	154.341	162.419	166.522
30	165.297	171.571	178.305
25	186.621	178.324	185.320

Una vez obtenidos los tiempos es posible calcular los volúmenes de los reactores en lote, tomando la ecuación (6.19b) para el caso en el que $V_{LOTE} \neq V_{CSTR}$, haciendo $\eta=1$ y tomando los valores de los volúmenes obtenidos por Andrietta (1994), para un tren de reactores continuos de mezcla perfecta, se emplearon 423, 370, 366, 359 y 320 litros. Además, se emplearon las concentraciones de sustrato y levadura correspondientes a las velocidades de dilución de 0.1, 0.42 y 1 1/h, para $P_{in}=0$ g/L, y para los casos en los que $C=52, 30$ y 25 g/L.

Fermentación

Con los volúmenes calculados, y sustituyéndolos en la ecuación (6.12) es posible calcular las productividades en lote. Y ya que la relación $\frac{P_{CSTR}}{P_{LOTE}} = 1$ las productividades del reactor en lote y en continuo son las mismas, por lo que las variaciones son respecto al volumen de los reactores, de lo cual cabe destacar que se requieren reactores más grandes para realizar la producción en lote en el mismo tiempo que el continuo y con la misma producción.

Concluyendo que la velocidad de dilución juega en un papel determinante para el diseño de los reactores, ya que conforme aumenta es posible obtener mayores productividades de etanol, pero esto puede resultar contraproducente ya que este se encontrará muy diluido y esto impactaría en los costos de separación.

Por otro lado, también se realizó un análisis de cómo es la relación entre el volumen de un biorreactor en lote con respecto a uno en continuo, para diferentes velocidades de dilución, como se muestra en la Figura 6.16.

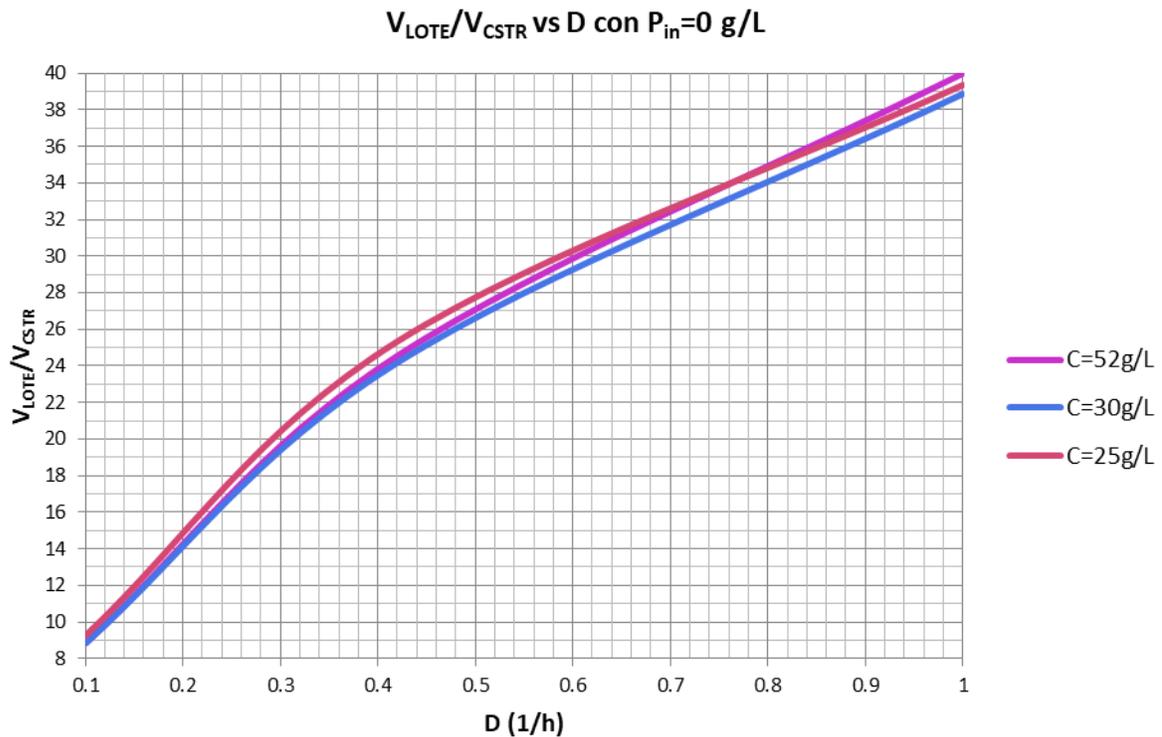


Figura 6.16 Resultados gráficos de la relación de V_{LOTE}/V_{CSTR} vs Velocidad de dilución con $P_{in}=0$ g/L para las concentraciones de levadura de 52, 30 y 25 g/L.

Fermentación

Obteniéndose que, con el aumento de la velocidad de dilución para un biorreactor de tanque agitado en operación continua, se requiere un biorreactor más grande, es decir, entre más alta sea la velocidad de dilución, se requerirá un biorreactor en lote de mayor volumen para igualar la productividad de uno en continuo.

También se puede apreciar que no existe una diferencia significativa en la relación de V_{LOTE}/V_{CSTR} si se mantienen concentraciones de levadura en el biorreactor menores a la en que se obtiene un punto crítico en cuanto a la concentración de etanol producido.

Para el caso en el que $V_{LOTE} = V_{CSTR}$ se empleó la ecuación, la productividad para un biorreactor en lote está dada por la ecuación (6.11):

$$P_f^{C^*} = Y_{P/S} (S_{in}^{C^*} - S^{C^*})$$

Para ello, se emplearon los tiempos obtenidos del campo de búsqueda de la Figura 6.15, y sustituyendo dichos datos se obtuvieron los resultados que se muestran en la Tabla 6.7:

Tabla 6.8 Productividades para reactores en lote con $P_{in}=0$ g/L

$C_{in}^{C^*}$ (g/L)	$S_{in}^{C^*}$ (g/L)	C^* (g/L)	S^{C^*} (g/L)	P^* (g/L)	$P_f^{C^*}$ (g/L)
45.4	219.7270	52	1	97.3335	97.3335
22.9	218.8280	30	1	96.9334	96.9334
17.9	218.8230	25	1	96.9312	96.9312

Para el biorreactor en continuo, la productividad a cierto tiempo viene dada por la siguiente ecuación:

$$P_f^{C^*D^*t^*} = D * t_{LOTE} * \{Y_{P/S} (S_{in}^{C^*D^*} - S^{C^*D^*})\} \tag{6.20}$$

Tomando los datos de concentraciones de sustrato y tiempos de reacción de las Tablas 6.5 y 6.7, y haciendo uso de la ecuación (6.20) se obtuvieron las siguientes productividades para el reactor en continuo:

Tabla 6.9 Productividades para reactores CSTR con $P_{in}=0$ g/L.

D(1/h)	$C_{in}^{C^*D^*}$ (g/L)	$S_{in}^{C^*D^*}$ (g/L)	C^* (g/L)	$S^{C^*D^*}$ (g/L)	t(h)	P^* (g/L)	$P_f^{C^*D^*t^*}$ (g/L)
0.1	48.5	126.615	52	1	154.341	55.898675	862.7457398
0.1	26.1	120.751	30	1	165.297	53.289195	880.8544066
0.1	21.2	117.308	25	1	186.621	51.75706	965.8954294
0.2	49.1	106.6	52	1	154.341	46.992	1450.558454
0.2	26.8	100.286	30	1	165.297	44.18227	1460.639337
0.2	21.9	96.584	25	1	186.621	42.53488	1587.580368

Fermentación

0.42	49.9	83.823	52	1	154.341	36.856235	2389.13983
0.42	27.5	77.32	30	1	165.297	33.9624	2357.83079
0.42	22.7	73.698	25	1	186.621	32.35061	2535.667339
0.6	50.3	72.824	52	1	154.341	31.96168	2959.798592
0.6	27.9	66.479	30	1	165.297	29.138155	2889.869764
0.6	23	62.898	25	1	186.621	27.54461	3084.241598
0.8	50.5	64.12	52	1	154.341	28.0884	3468.153396
0.8	28.2	58.026	30	1	165.297	25.37657	3355.736713
0.8	23.3	54.61	25	1	186.621	23.85645	3561.691644
1	50.8	57.618	52	1	154.341	25.19501	3888.623038
1	28.4	51.732	30	1	165.297	22.57574	3731.702095
1	23.5	48.476	25	1	186.621	21.12682	3942.708275

De la Tabla 6.9 es posible observar que existe una mayor productividad con un biorreactor en continuo que con un biorreactor en lote ya que se tiene una notable diferencia. Con velocidades de dilución elevadas se obtiene una mayor cantidad de producto, sin embargo, debe tomarse en cuenta nuevamente, que este estará más diluido y esto podría impactar en los costos de separación.

Una vez concluido que se obtienen mayores productividades con un biorreactor en continuo, conviene analizar el comportamiento de dicho reactor en términos de productividades y concentraciones de producto, en este caso, de bioetanol.

Es necesario hacer énfasis en que la concentración de etanol es el producto del coeficiente de rendimiento producto/sustrato por la diferencia de las concentraciones de entrada y final de sustrato; y que la productividad de bioetanol es el resultado del producto de la concentración por la velocidad de dilución y tiempo de reacción de un reactor en lote. Ambas están relacionadas de forma inversa proporcional, ya que con el aumento de la productividad la concentración disminuye, y con el aumento de la concentración la productividad disminuye, esto puede apreciarse mejor en la Figura 6.17, donde se indican las concentraciones de etanol con líneas sólidas y las productividades de etanol con líneas punteadas.

Nuevamente, se puede observar que la velocidad de dilución juega un papel importante, en cuanto a la productividad, esta es directamente proporcional con la velocidad de dilución, ya que, con el aumento de esta, se tiene un incremento en la productividad.

Fermentación

En cambio, para la concentración de bioetanol se tiene una relación inversamente proporcional con la velocidad de dilución, debido a que, con el aumento de esta, se tiene una disminución en la concentración de bioetanol. Por lo anterior, si bien podría pensarse que es conveniente tener altas productividades, debe de tomarse en cuenta que el producto se encontrará bastante diluido, por lo que sería recomendable manejar velocidades de dilución intermedias.

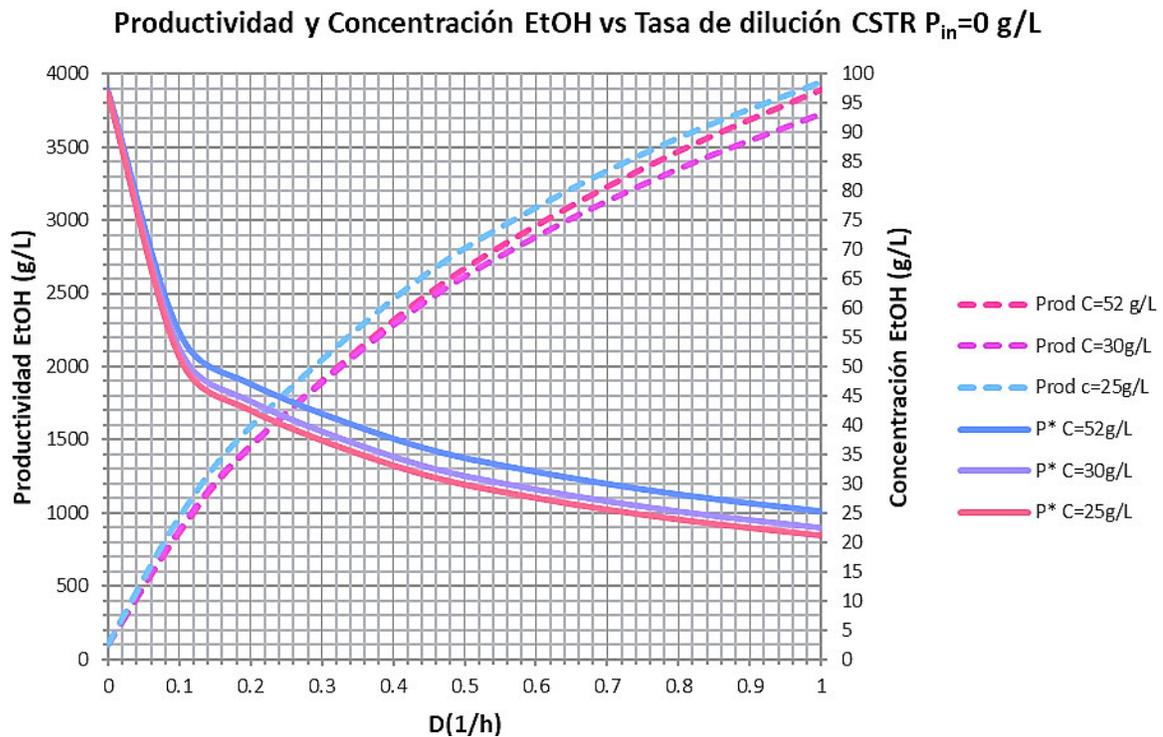


Figura 6.17 Resultados gráficos de productividad y concentración de etanol vs velocidad de dilución con $P_{in}=0$ g/L, para concentraciones de levadura de 52, 30 y 25 g/L.

En cuanto a las concentraciones de levadura que se desean obtener dentro del reactor, en la Figura 6.16 se observa que, para concentraciones de levadura de 52, 30 y 25 g/L no existe una diferencia significativa en cuanto a las productividades y concentraciones de etanol.

6.5 Conclusiones

Con las simulaciones realizadas se pudo visualizar que, si se quiere tener un consumo máximo de sustrato y de producción de etanol, se debe de enfocar especial atención en la concentración de levadura que se alimenta, ya que existe un punto crítico en función de esta.

No existe una diferencia significativa en cuanto a consumo de sustrato, producción de etanol y aumento en la velocidad de crecimiento de levadura si se emplean concentraciones de levadura menores al punto crítico.

La velocidad de dilución juega un papel importante en la fermentación y por tanto en la producción de etanol, ya que se observó que con el aumento de dichas velocidades disminuye el tiempo de residencia, lo cual influye directamente en la reacción disminuyendo su conversión de glucosa a etanol.

Las superficies de respuesta obtenidas son las gráficas conclusivas de este capítulo, ya que se demostró que no existe una diferencia significativa en cuanto a rendimientos y producción cuando se manejaban concentraciones de levadura en el reactor menores al punto crítico, además de que se demostró que, al manejar un tren de reactores de tanque agitado en operación continua, se pueden alcanzar concentraciones de etanol muy cercanas a las obtenidas en las típicas operaciones en lote.

Se validaron los resultados obtenidos mediante la optimización por “Algoritmos genéticos”, comprobando que la técnica “Brutish Scanning” no sólo es una herramienta útil para encontrar los óptimos, sino también para localizar puntos cercanos a los óptimos que no impacten significativamente en los valores de las variables de salida, y que permitan el proceso de forma más sencilla.

Por lo que se determinaron los valores de las variables de entrada a las cuales se obtiene un consumo casi total del sustrato alimentado, trayendo como resultado una producción máxima de etanol, sin embargo, debe tomarse en cuenta que a pesar de que el modelo matemático empleado está basado en la fermentación de glucosa a etanol en un reactor de escala industrial, las simulaciones no suelen coincidir exactamente con el proceso real.

7. Integración de la Biorefinería y balances de masa

7.1 Biorefinería en lote para BCA y PCA sin evaporación

En las Tablas 7.1 y 7.2 se muestran los balances de masa para la operación en lote a partir de BCA y PCA respectivamente, sin la etapa de evaporación, tomando en cuenta un 10% p/v para realizar la hidrólisis enzimática con 60 FPU, se eligieron estas condiciones de operación debido a que esta es la mayor concentración de complejo enzimático y porque la carga de biomasa es la más típica en este tipo de procesos.

En las Figuras 7.1 y 7.2 se muestran los balances de masa para BCA y PCA respectivamente, para cada una de las etapas de proceso involucradas permitiendo tener una mejor visualización de las entradas y salidas de cada uno de los componentes.

Como se puede observar en ambos balances, la mayor concentración de glucosa se obtiene a partir del BCA, siendo este también el que requiere la menor cantidad de agua para llevar a cabo la hidrólisis enzimática, por lo tanto, la fracción etanol/agua correspondiente a la operación en lote a partir de BCA es de 0.0402 y para el PCA es de 0.0289, si se tuviera que elegir entre una de las dos biorefinerías la más factible sería a partir del BCA.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

Tabla 7.1 Balances de masa para operación en lote a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		FERMENTACIÓN	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Componente (g/L)										
Celulosa	88.0282	78.6024	78.6024	78.6024	78.6024	1.1602	2.5354	0	0	0
Hemicelulosa	45.4225	12.1343	12.1343	12.1343	12.1343	0.1316	0.2875	0	0	0
Lignina	16.6847	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	0	0	0
Extractivos	12.3781	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	0	0	0
Agua	954.7376	954.7376	954.7376	0	925.1363	925.1363	925.1363	925.1363	925.1363	925.1363
Residuos	0	62.5135	62.5135	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	86.0103	83.9618	83.9618	83.9618	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.0298	0.0298	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	13.6351	13.4580	13.4580	13.4580	34.8330
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	45.4000	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	37.1928
TOTAL	1117.2512	1117.2512	1117.2512	100.0000	1025.1363	1035.3666	1035.1659	1022.5561	1067.9561	951.2407

Integración de la Biorefinería y balances de masa

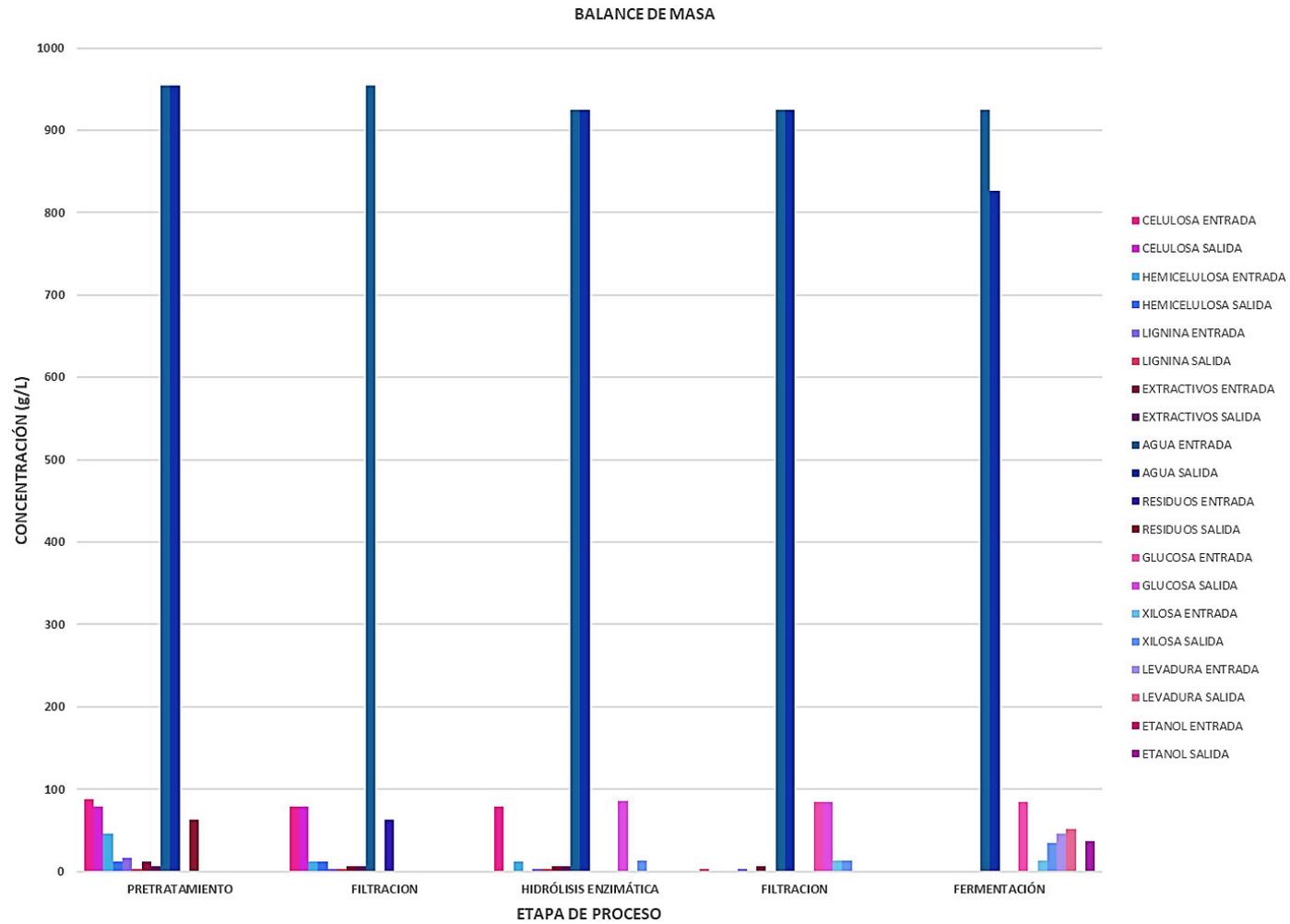


Figura 7.1 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.1.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

7.2 Balances de masa para operación en lote a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		FERMENTACIÓN	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Componente (g/L)										
Celulosa	33.1301	66.0000	66.0000	66.0000	66.0000	6.4244	6.4244	0	0	0
Hemicelulosa	26.2501	8.3000	8.3000	8.3000	8.3000	0.6466	0.6466	0	0	0
Lignina	18.2101	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	0	0	0
Extractivos	15.3101	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	0	0	0
Agua	928.6573	928.6573	928.6573	0	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211
Residuos	0	100.2623	100.2623	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	65.2475	65.2475	65.2475	65.2475	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.8954	0.8954	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	8.6942	8.6942	8.6942	8.6942	8.6942
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	45.4000	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	28.9028
TOTAL	1021.5577	1128.9196	1128.9196	100.0000	1099.9211	1107.5292	1107.5292	1073.8628	1119.2628	1090.5181

Integración de la Biorefinería y balances de masa

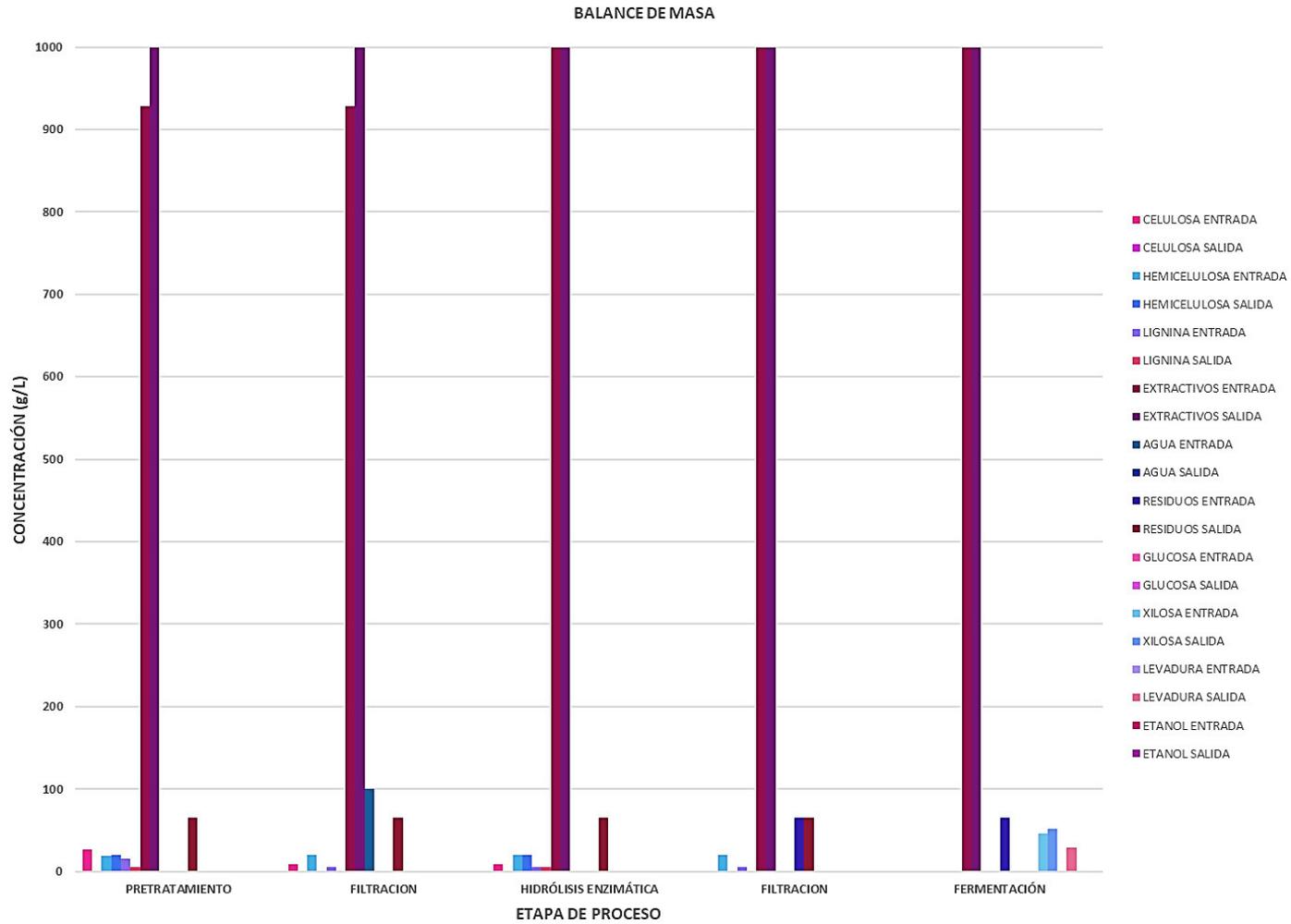


Figura 7.2 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.2.

7.2 Biorefinería en lote para BCA y PCA con evaporación

En las Tablas 7.3 y 7.4 se muestran los balances de masa para la operación en lote a partir de BCA y PCA respectivamente, con la etapa de evaporación, esto para analizar el comportamiento del proceso de la biorefinería realizando una concentración de azúcares reductores totales, tomando en cuenta un 10% p/v para realizar la hidrólisis enzimática con 60 FPU.

En las Figuras 7.3 y 7.4 se muestran los balances de masa para BCA y PCA respectivamente, para cada una de las etapas de proceso involucradas permitiendo tener una mejor visualización de las entradas y salidas de cada uno de los componentes.

Tabla 7.3 Balances de masa para operación en lote a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, con evaporación

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		EVAPORACION		FERMENTACIÓN		
	Componente (g/L)	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	88.0282	78.6024	78.6024	78.6024	78.6024	1.1602	2.5354	0	0	0	0	0	0
Hemicelulosa	45.4225	12.1343	12.1343	12.1343	12.1343	0.1316	0.2875	0	0	0	0	0	0
Lignina	16.6847	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	0	0	0	0	0	0
Extractivos	12.3781	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	0	0	0	0	0	0
Agua	954.7376	954.7376	954.7376	0	925.1363	925.1363	925.1363	925.1363	925.1363	826.2149	826.2149	826.2149	826.2149
Residuos	0	62.5135	62.5135	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	86.0103	83.9618	83.9618	83.9618	219.7269	219.7269	1.0000	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.0298	0.5236	0	0	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	13.6351	13.4580	13.4580	13.4580	34.8330	34.8330	34.8330	34.8330
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	45.4000	52.0000	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	97.3330	97.3330
TOTAL	1117.2512	1117.2512	1117.2512	100.0000	1025.1363	1035.3666	1035.1659	1022.5561	1022.5561	1080.7748	1126.1748	1011.3809	1011.3809

Integración de la Biorefinería y balances de masa

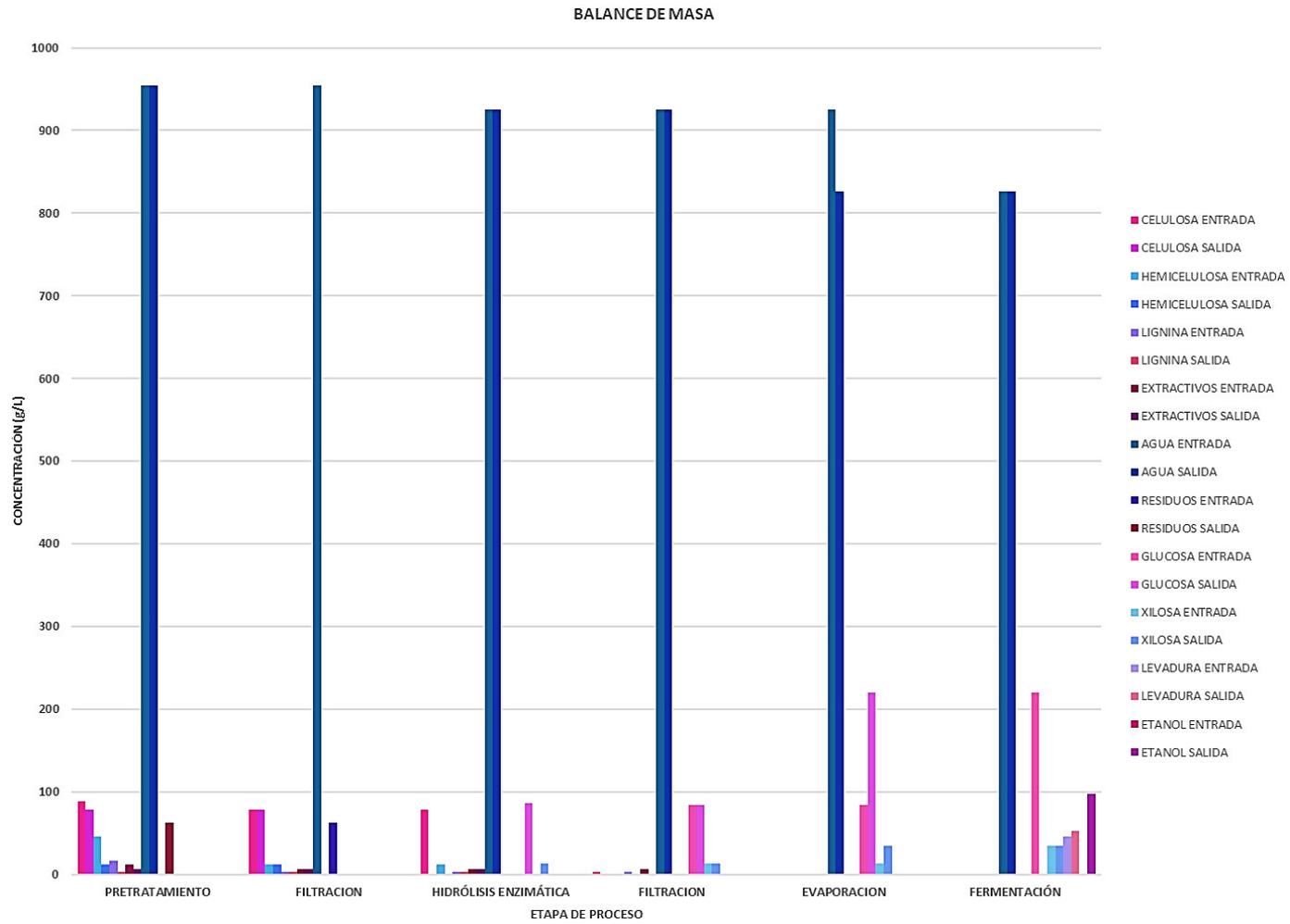


Figura 7.3 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.3.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

Como en el caso de la biorefinería sin evaporación la mayor concentración de glucosa se obtiene a partir del BCA, siendo este también el que requiere la menor cantidad de agua para llevar a cabo la hidrólisis enzimática, por lo tanto, se puede observar que las fracciones etanol/agua son de 0.1178 para el BCA y 0.1172 para el PCA, si se tuviera que elegir entre unas de las dos biorefinerías la más factible sería a partir del BCA, aunque no existe una diferencia significativa entre ellas.

En cuanto a la inclusión de la etapa de evaporación, se obtuvo que la fracción etanol/agua aumenta un 193% para el BCA y un 305% para el PCA, por lo que el proceso se ve beneficiado al realizar esta operación ya que se incrementa considerablemente la fracción de etanol/agua.

Tabla 7.4 Balances de masa para operación en lote a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU.

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		EVAPORACION		FERMENTACIÓN		
	Componente (g/L)	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	33.1301	66.0000	66.0000	66.0000	66.0000	6.4244	6.4244	0	0	0	0	0	0
Hemicelulosa	26.2501	8.3000	8.3000	8.3000	8.3000	0.6466	0.6466	0	0	0	0	0	0
Lignina	18.2101	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	0	0	0	0	0	0
Extractivos	15.3101	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	0	0	0	0	0	0
Agua	928.6573	928.6573	928.6573	0	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	829.8254	829.8254	829.8254	829.8254
Residuos	0	100.2623	100.2623	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	65.2475	65.2475	65.2475	65.2475	219.7269	219.7269	1.0000	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.8954	0.8954	0	0	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	8.6942	8.6942	8.6942	8.6942	29.2786	29.2786	29.2786	29.2786
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	45.4000	52.0000	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	97.3330	97.3330
TOTAL	1117.25116	1117.25116	1117.25116	100.0000	1025.13626	1035.16594	1035.16594	1022.5561	1022.5561	1080.77481	1126.17481	1011.3809	1011.3809

Integración de la Biorefinería y balances de masa

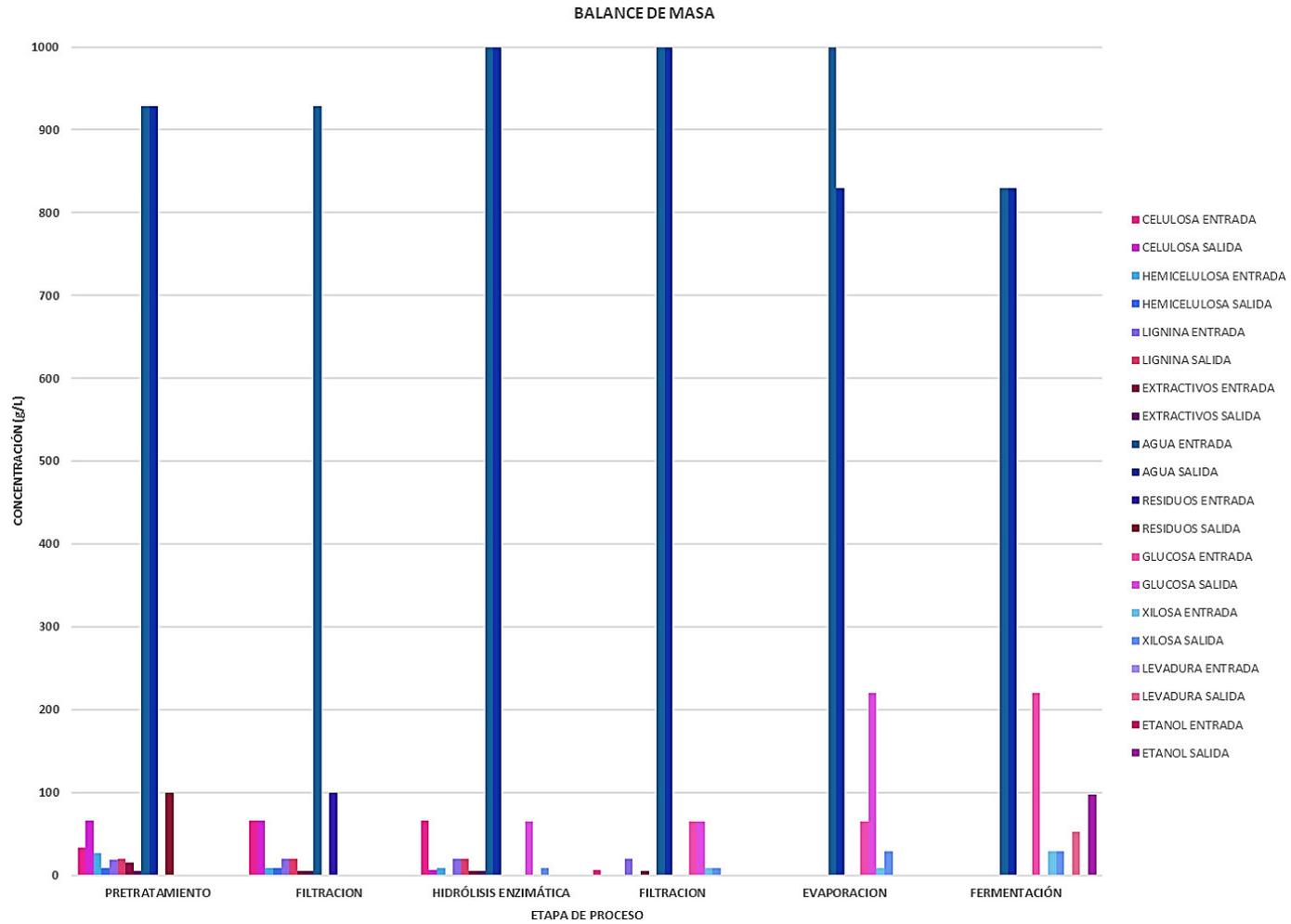


Figura 7.4 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.4.

7.3 Biorefinería en continuo para BCA y PCA sin evaporación

En las Tablas 7.5 y 7.6 se muestran los balances de masa para la operación en continuo, se eligió un solo reactor de tanque agitado en operación continua para llevar a cabo la hidrólisis enzimática con una carga de 10% p/v de BCA y PCA pretratadas, 60 FPU y una velocidad de dilución de 0.1 1/h, para pasar directamente a la etapa de fermentación en un solo reactor de tanque ahitado en operación continua, esto por las bajas concentraciones que se obtienen de glucosa de la etapa de sacarificación, llevándose a cabo igualmente a una velocidad de dilución de 0.1 1/h.

En las Figuras 7.5 y 7.6 se muestran los balances de masa para BCA y PCA respectivamente, para cada una de las etapas de proceso involucradas permitiendo tener una mejor visualización de las entradas y salidas de cada uno de los componentes.

Tabla 7.5 Balances de masa para operación en continuo con $D=0.1$ 1/h a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación.

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		FERMENTACIÓN		
	Componente (g/L)	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	88.0282	78.6024	78.6024	78.6024	78.6024	50.9537	50.9537	0	0	0	0
Hemicelulosa	45.4225	12.1343	12.1343	12.1343	12.1343	6.5148	6.5148	0	0	0	0
Lignina	16.6847	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	0	0	0	0
Extractivos	12.3781	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	0	0	0	0
Agua	954.7376	954.7376	954.7376	0	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360
Residuos	0	62.5135	62.5135	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	29.9333	29.9333	29.9333	29.9333	29.9333	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.7429	0.7429	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	6.3789	6.3789	6.3789	6.3789	6.3789	6.3789
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	0	46.1400	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13.2150
TOTAL	1117.2512	1117.2512	1117.2512	100.0000	1025.1360	1028.9230	1028.9230	961.4483	1007.5883	997.7299	

Integración de la Biorefinería y balances de masa

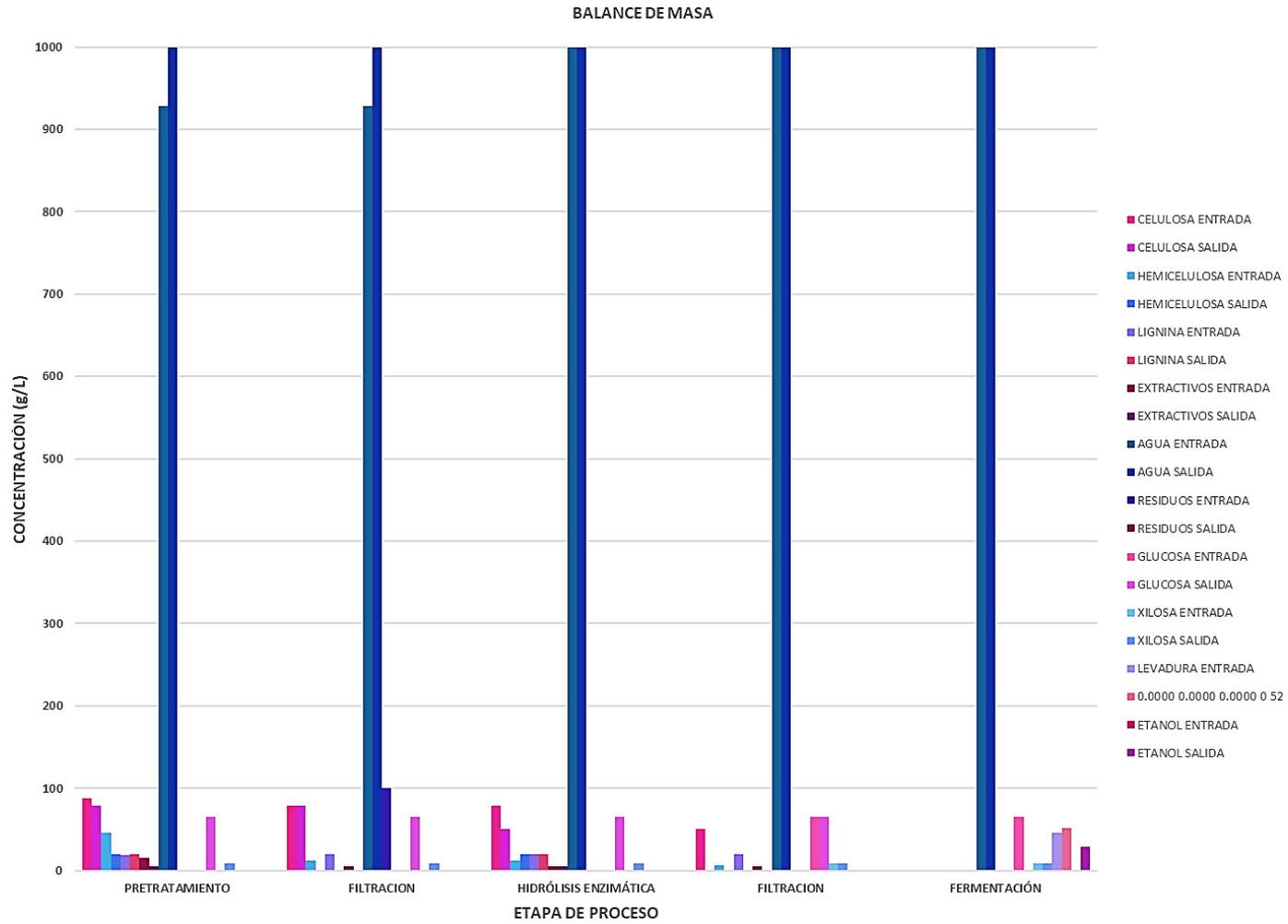


Figura 7.5 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.5.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

Tabla 7.6 Balances de masa para operación en continuo con $D=0.1$ 1/h a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, sin evaporación.

ETAPAS DE PROCESO	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		FERMENTACIÓN		
	Componente (g/L)	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	33.1301	66.0000	66.0000	66.0000	66.0000	43.9761	43.9761	0	0	0	0
Hemicelulosa	26.2501	8.3000	8.3000	8.3000	8.3000	4.9254	4.9254	0	0	0	0
Lignina	18.2101	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	0	0	0	0
Extractivos	15.3101	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	0	0	0	0
Agua	928.6573	928.6573	928.6573	0	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211
Residuos	0	100.2623	100.2623	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	23.8507	23.8507	23.8507	23.8507	23.8507	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.5873	0.5873	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	3.8335	3.8335	3.8335	3.8335	3.8335	3.8335
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	46.1400	52.0000	
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10.5296
TOTAL	1021.5577	1128.9196	1128.9196	100.0000	1099.9211	1102.7941	1102.7941	1027.6053	1073.7453	1067.2842	

Al observar ambos balances, se puede apreciar que la mayor concentración de glucosa se adquiere a partir del BCA, siendo este también el que requiere la menor cantidad de agua para realizar la hidrólisis enzimática, por lo tanto, la fracción etanol/agua para el BCA y PCA es de 0.0142 y de 0.0105 respectivamente, siendo la mayor para el BCA al igual que para la operación en lote sin y con evaporación, aunque para este caso no existe una diferencia significativa entre ambas fracciones.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

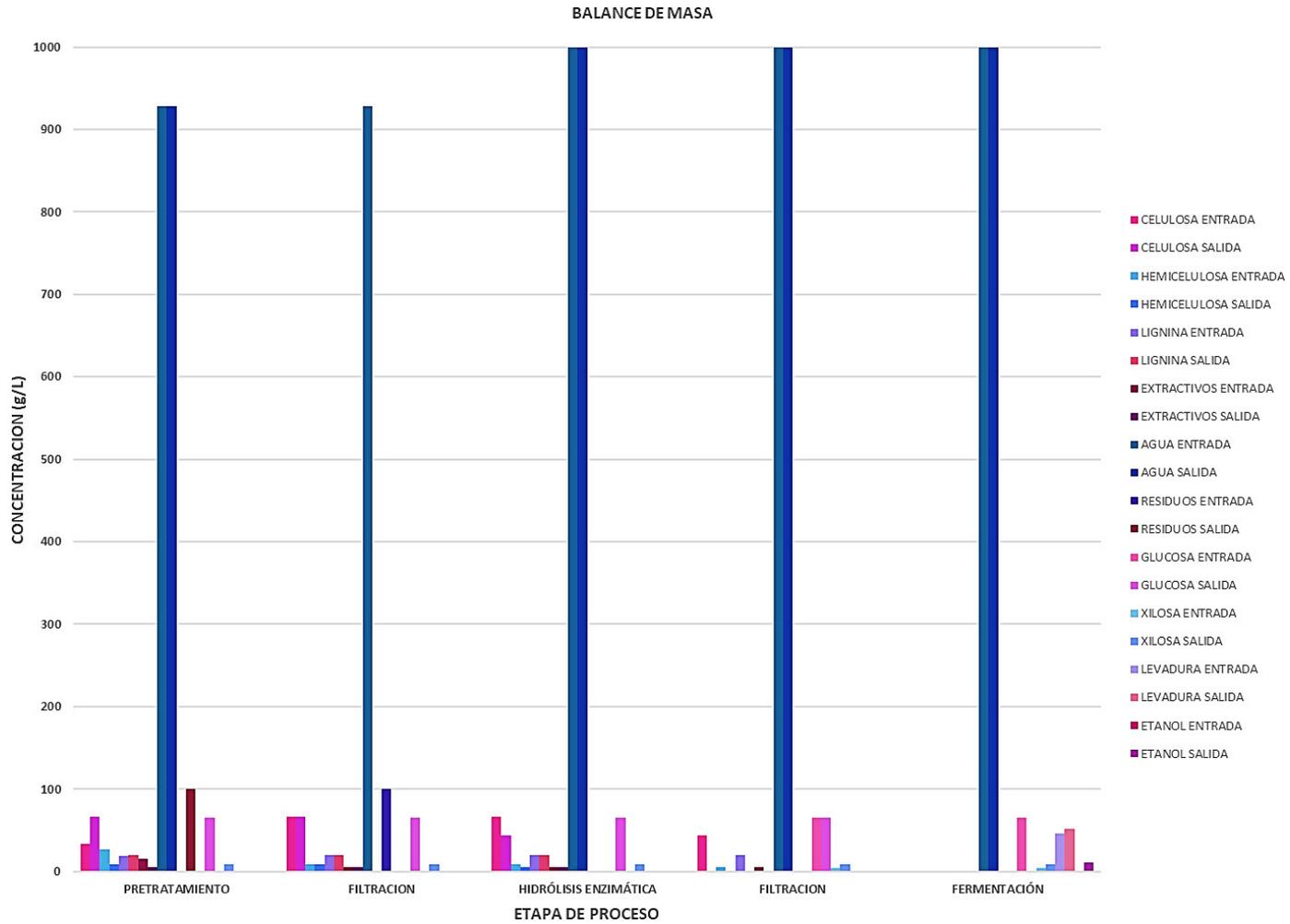


Figura 7.6 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.6.

7.4 Biorefinería en continuo para BCA y PCA con evaporación

En las Tablas 7.7 y 7.8 se muestran los balances de masa para la operación en continuo, se eligió un solo reactor de tanque agitado en operación continua para llevar a cabo la hidrólisis enzimática con una carga de 10% p/v de BCA y PCA pretratadas, 60 FPU y una velocidad de dilución de 0.1 1/h, para la fermentación se muestran los resultados de un tren de cinco reactores operando con la concentración máxima de glucosa que puede ser alimentada, igualmente a una velocidad de dilución de 0.1 1/h. Al observar ambos balances, se puede apreciar que la mayor concentración de glucosa se adquiere a partir del BCA, siendo este también el que requiere la menor cantidad de agua para realizar la hidrólisis enzimática.

En las Figuras 7.7 y 7.8 se muestran los balances de masa para BCA y PCA respectivamente, para cada una de las etapas de proceso involucradas permitiendo tener una mejor visualización de las entradas y salidas de cada uno de los componentes.

Tabla 7.7 Balances de masa para operación en continuo con $D=0.1$ 1/h a partir de BCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, con evaporación.

Componente (g/L)	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		EVAPORACION		FERMENTACIÓN	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	88.0282	78.6024	78.6024	78.6024	78.6024	50.9537	50.9537	0	0	0	0	0
Hemicelulosa	45.4225	12.1343	12.1343	12.1343	12.1343	6.5148	6.5148	0	0	0	0	0
Lignina	16.6847	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	3.2503	0	0	0	0	0
Extractivos	12.3781	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	6.0130	0	0	0	0	0
Agua	954.7376	954.7376	954.7376	0	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360	925.1360	826.6348	826.6348	826.6348
Residuos	0	62.5135	62.5135	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	29.9333	29.9333	29.9333	29.9333	209.0843	209.0843	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.7429	0.7429	0	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	6.3789	6.3789	6.3789	6.3789	44.5567	44.5567	44.5567
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	46.1400	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	92.5974
TOTAL	1117.2512	1117.2512	1117.2512	100.0000	1025.1360	1028.9230	1028.9230	961.4483	961.4483	1080.2758	1126.4158	1016.7889

Integración de la Biorefinería y balances de masa

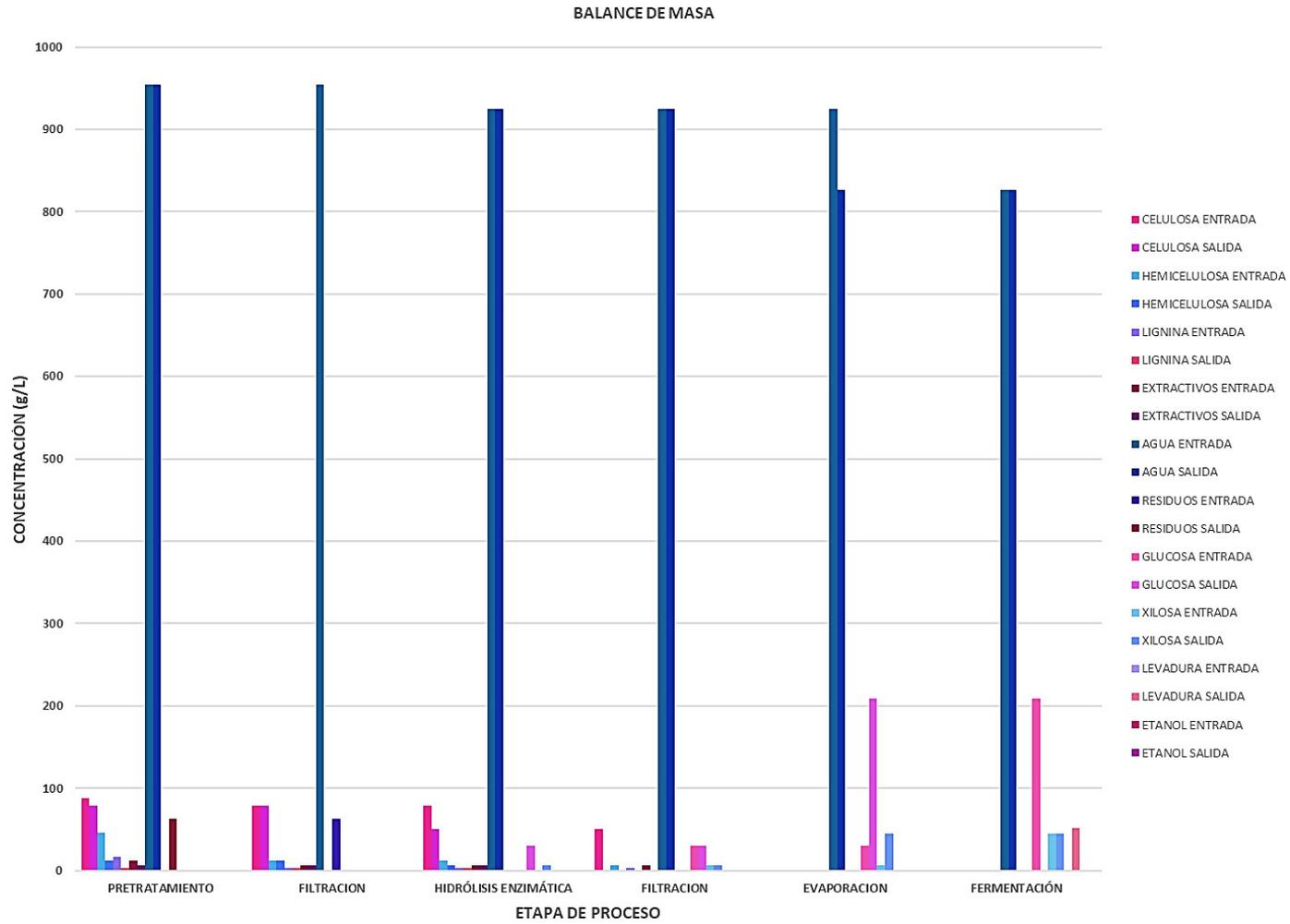


Figura 7.7 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.7.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

Tabla 7.8 Balances de masa para operación en continuo con $D=0.1$ 1/h a partir de PCA, con hidrólisis enzimática 10% p/v y 60 FPU, con evaporación.

Componente (g/L)	PRETRATAMIENTO		FILTRACION		HIDRÓLISIS ENZIMÁTICA		FILTRACION		EVAPORACION		FERMENTACIÓN	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Celulosa	33.1301	66.0000	66.0000	66.0000	66.0000	43.9761	43.9761	0	0	0	0	0
Hemicelulosa	26.2501	8.3000	8.3000	8.3000	8.3000	4.9254	4.9254	0	0	0	0	0
Lignina	18.2101	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	20.2000	0	0	0	0	0
Extractivos	15.3101	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	5.5000	0	0	0	0	0
Agua	928.6573	928.6573	928.6573	0	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	999.9211	833.7526	833.7526	833.7526
Residuos	0	100.2623	100.2623	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Glucosa	0	0	0	0	0	23.8507	23.8507	23.8507	23.8507	209.0848	209.0848	1.0000
Celobiosa	0	0	0	0	0	0.5873	0.5873	0	0	0	0	0
Xilosa	0	0	0	0	0	3.8335	3.8335	3.8335	3.8335	33.6061	33.6061	33.6061
Levadura	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	46.1400	52.0000
Etanol	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	92.5974
TOTAL	1117.25116	1117.25116	1117.25116	100.0000	1025.13626	1035.16594	1035.16594	1022.5561	1022.5561	1080.77481	1126.17481	1011.3809

Las fracciones etanol/agua para el BCA y PCA son 0.1120 y 0.1110 respectivamente, aumentando en un 688% y 957% con respecto al proceso en continuo que se lleva a cabo sin evaporación, por lo que la inclusión de la etapa de evaporación resulta bastante beneficiosa para incrementar la fracción etanol/agua y así facilitar la etapa de separación posterior a la fermentación.

En el Apéndice B se encuentran las condiciones de operación de los evaporadores para la operación en lote y continuo ($D=0.1$ 1/h) al ser alimentados por una carga de 10% p/v de BCA y PCA pretratadas y después hidrolizadas con una concentración de enzima de 60 FPU.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

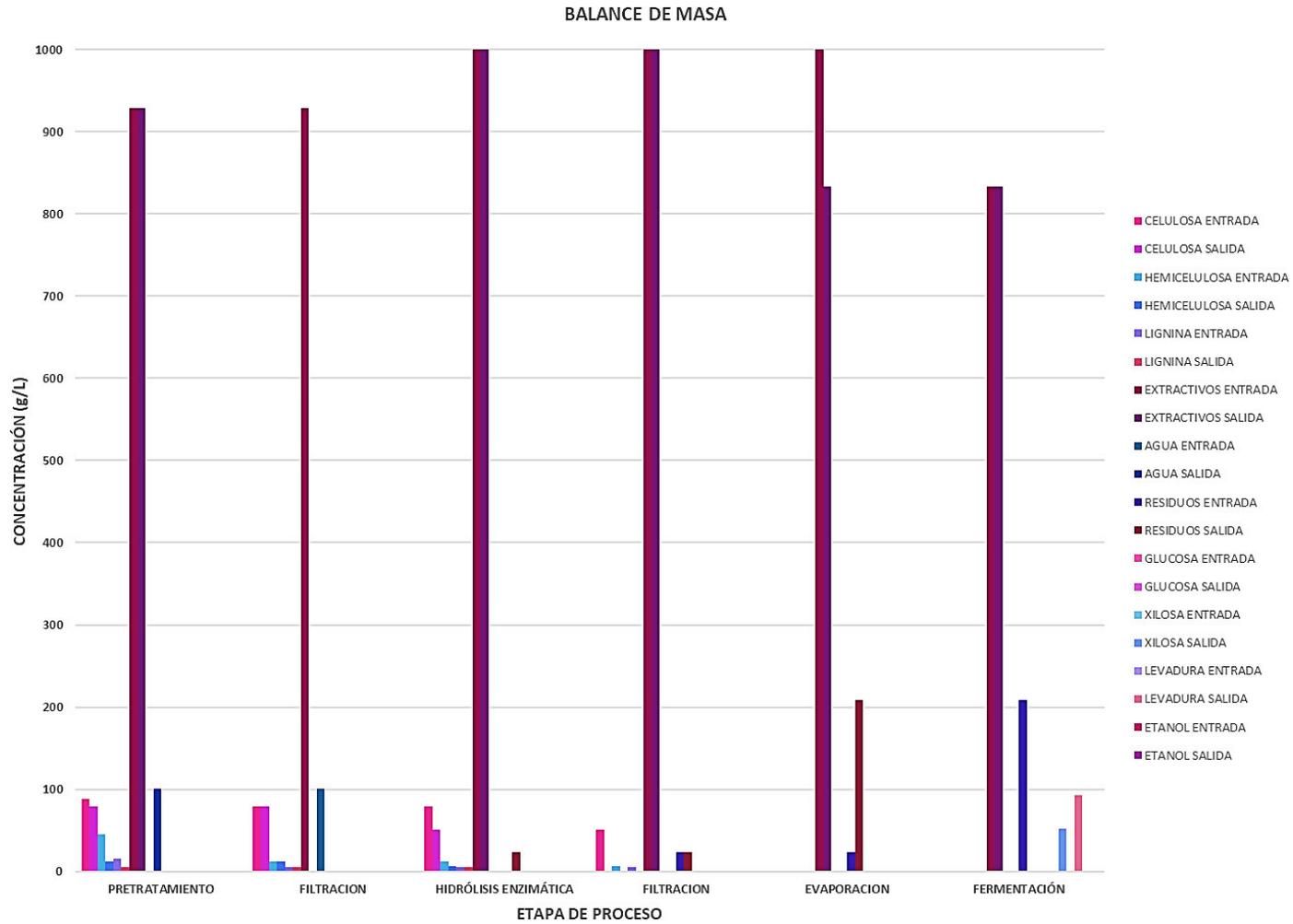


Figura 7.8 Resultados gráficos del balance de masa correspondiente a la Tabla 7.8.

7.5 Biorefinería integrada con BCA y PCA

Como se pudo observar en los balances de la sección anterior, la inclusión de la etapa de evaporación resulta bastante beneficiosa ya que permite incrementar considerablemente la fracción etanol/agua, tanto para la operación en lote y continuo.

Observando los balances de masa, después de la etapa de evaporación se obtienen las mismas concentraciones de glucosa para BCA y PCA, por lo que las corrientes de salida de la evaporación podrían integrarse en una sola corriente para pasar a la etapa de fermentación y así determinar qué tan conveniente es integrar ambas biomásas en una sola fermentación al observar con cuál de ellas se obtiene la mayor fracción etanol/agua.

7.5.1 Biorefinería integrada para operación en lote

En la Tabla 7.9 se muestran los resultados de la integración de corrientes de salida de la evaporación de BCA y PCA y una comparación al realizar las fermentaciones por separado, en la Figura 7.9 se pueden observar estos resultados de forma gráfica.

De los resultados obtenidos, se puede determinar que la diferencia de la fracción etanol/agua es despreciable siendo esta por diezmilésimas, y operativamente hablando se puede considerar la misma para las tres opciones, sin embargo, la mejor opción de biorefinería es para la que emplea BCA como materia prima, seguida de la biorefinería con fermentación integrada y por último la biorefinería a partir del PCA.

Tabla 7.9 Comparación de los resultados de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en lote.

Componente (g/L)	FERMENTACIÓN INTEGRADA		BCA		PCA	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Agua	828.0201	828.0201	826.2149	826.2149	829.8254	829.8254
Xilosa	32.0558	32.0558	34.8330	34.8330	29.2786	29.2786
Glucosa	219.7269	1.0000	219.7269	1.0000	219.7269	1.0000
Levadura	45.4000	52.0000	45.4000	52.0000	45.4000	52.0000
Etanol	0	97.333	0	97.333	0	97.3330
Fracción Et/Ag	-	0.1175	-	0.1178	-	0.1173

Integración de la Biorefinería y balances de masa

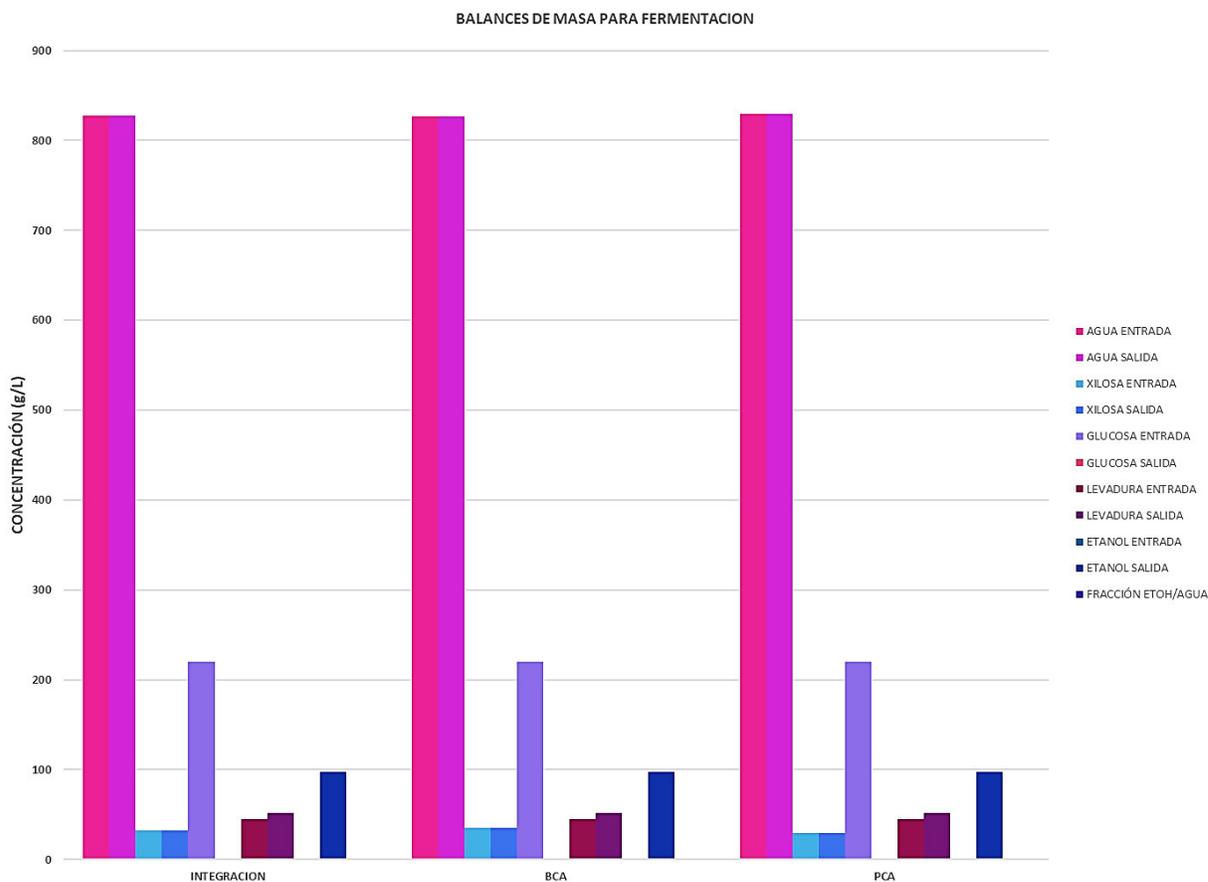


Figura 7.9 Resultados gráficos de la comparación de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en lote.

7.5.2 Biorefinería integrada para operación en continuo

En la Tabla 7.10 se muestran los resultados de la integración de corrientes de salida de la evaporación de BCA y PCA y una comparación al realizar las fermentaciones por separado, en la Figura 7.10 se pueden observar estos resultados de forma gráfica.

Al igual que con la biorefinería de operación en lote, se tiene la misma tendencia, siendo la mejor opción la biorefinería a partir de BCA, seguida por la biorefinería con fermentación integrada y por último la biorefinería con PCA, de la misma forma esta diferencia es de diezmilésimas al comparar la de fermentación integrada con BCA, y de milésimas al comparar BCA con PCA, al ser una diferencia tan pequeña entre estas, la opción de tener una fermentación integrada resulta factible ya que se pueden ahorrar equipos en esta etapa.

Integración de la Biorefinería y balances de masa

Al comparar la fracción etanol/agua de las biorefinerías con fermentación integrada con operación en lote y continuo, esta es de 0.0057 a favor de la operación en lote, sin embargo, esta diferencia resulta despreciable, por lo que con estos resultados se valida al menos conceptualmente que la operación en continuo es equiparable a la operación en lote.

Tabla 7.10 Comparación de los resultados de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en continuo.

Componente (g/L)	FERMENTACIÓN INTEGRADA		BCA		PCA	
	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA	ENTRADA	SALIDA
Agua	830.1937	828.0201	826.6348	826.6348	833.7526	833.7526
Xilosa	39.0814	39.0814	44.5567	44.5567	33.6061	33.6061
Glucosa	209.0845	1.0000	209.0843	1.0000	209.0843	1.0000
Levadura	46.1400	52.0000	46.1400	52.0000	46.1400	52.0000
Etanol	0	92.5974	0	92.5974	0	92.5974
Fracción Et/Ag	-	0.1118	-	0.1120	-	0.1111

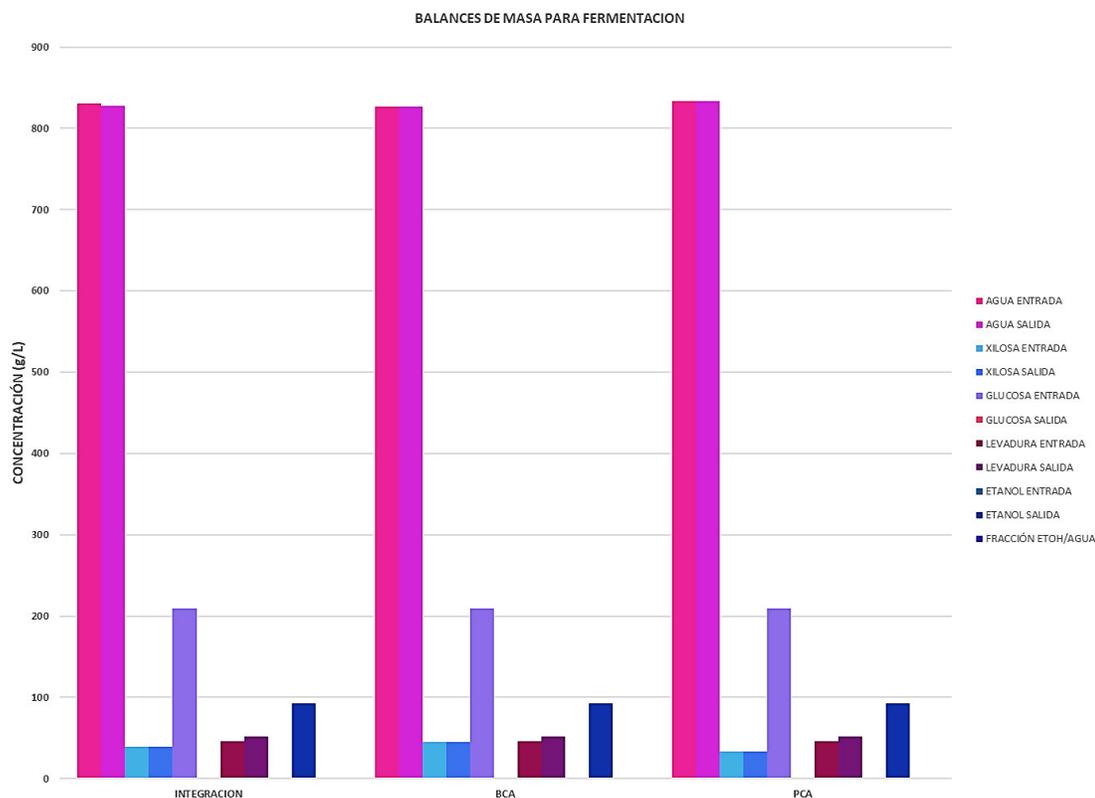


Figura 7.10 Resultados gráficos de la comparación de una fermentación integrada con BCA y PCA para una operación en continuo.

8. Conclusiones

Este trabajo permitió conocer el comportamiento de diferentes condiciones de operación de las etapas de procesamiento en las biorefinerías propuestas para la producción de bioetanol de segunda generación, y así establecer los criterios bajo los cuales es posible obtener un diseño óptimo de estas.

Se simuló y se diseñó la etapa de sacarificación por hidrólisis enzimática a partir de BCA y PCA en lote y continuo, mediante la aplicación de un modelo matemático que toma en cuenta las cinéticas de las reacciones involucradas.

Con respecto a la hidrólisis enzimática, se determinó que si se estudia dicha etapa por separado la mejor operación es en lote, ya que con esta se obtienen las más altas cantidades de azúcares reductores. Para la operación en continuo las mejores condiciones de operación son con bajas velocidades de dilución y altas concentraciones de complejo enzimático.

Del estudio de la etapa de sacarificación se determinó que la mejor biomasa es el BCA, ya que de esta se obtienen las mayores concentraciones de azúcares reductores.

La simulación de la etapa de evaporación para la concentración de azúcares reductores permitió visualizar que se deben manejar fracciones en la corriente líquida menores a 0.3, ya que con valores mayores a estos se obtienen altas concentraciones de glucosa que no pueden ser fermentadas debido a que causarían problemas de inhibición por sustrato.

Respecto al diseño de la etapa de evaporación, se obtuvo que al tratar hidrolizados filtrados provenientes de BCA se requiere una menor cantidad de vapor, menores cargas térmicas y por lo tanto menores áreas de transferencia de calor.

La concentración de azúcares reductores por evaporación resulta una muy buena opción para obtener las concentraciones de glucosa óptimas para satisfacer la etapa de fermentación.

La simulación de la etapa de fermentación permitió visualizar el comportamiento de todo el proceso y así identificar que existen puntos críticos con respecto a la concentración de

Conclusiones

levadura, pero que, sin embargo, se pueden manejar valores menores de esta ya que no existe una diferencia significativa con respecto a los valores de las variables de salida.

Se determinó que las más altas concentraciones de etanol se obtienen con la operación en lote, sin embargo, al operar con un tren de reactores de tanque agitado en operación continua casi se logran alcanzar dichas concentraciones al operar con bajas velocidades de dilución.

La mayor fracción etanol/agua se obtiene a partir del BCA con respecto al PCA, tanto para la operación en lote como en continuo.

Los resultados obtenidos por la estrategia “Brutish Scanning” fueron validados mediante una optimización multiobjetivo por “Algoritmos genéticos”.

Se diseñaron biorefinerías con operación en lote y continuo a partir de BCA y PCA, siendo la mejor opción el BCA, ya que con esta se obtienen las mayores fracciones etanol/agua, aunque la diferencia con respecto al PCA no es significativa.

Se diseñaron biorefinerías con fermentación integrada para BCA y PCA con operación en lote y continuo, resultando que con la operación en lote se obtienen las mayores fracciones etanol/agua, sin embargo, la diferencia con la operación en continuo es despreciable, por lo que la operación en continuo se posiciona como una opción factible y equiparable.

En conclusión, conceptualmente hablando es posible producir bioetanol de segunda generación en continuo siempre que se tomen en cuenta modelos matemáticos que involucren las cinéticas de las reacciones de las etapas de procesamiento.

APENDICE A. RESULTADOS GRÁFICOS DEL DISEÑO EN LA EVAPORACIÓN

A1. BAGAZO DE CAÑA DE AZÚCAR

A.1.1 Vapor efecto 2

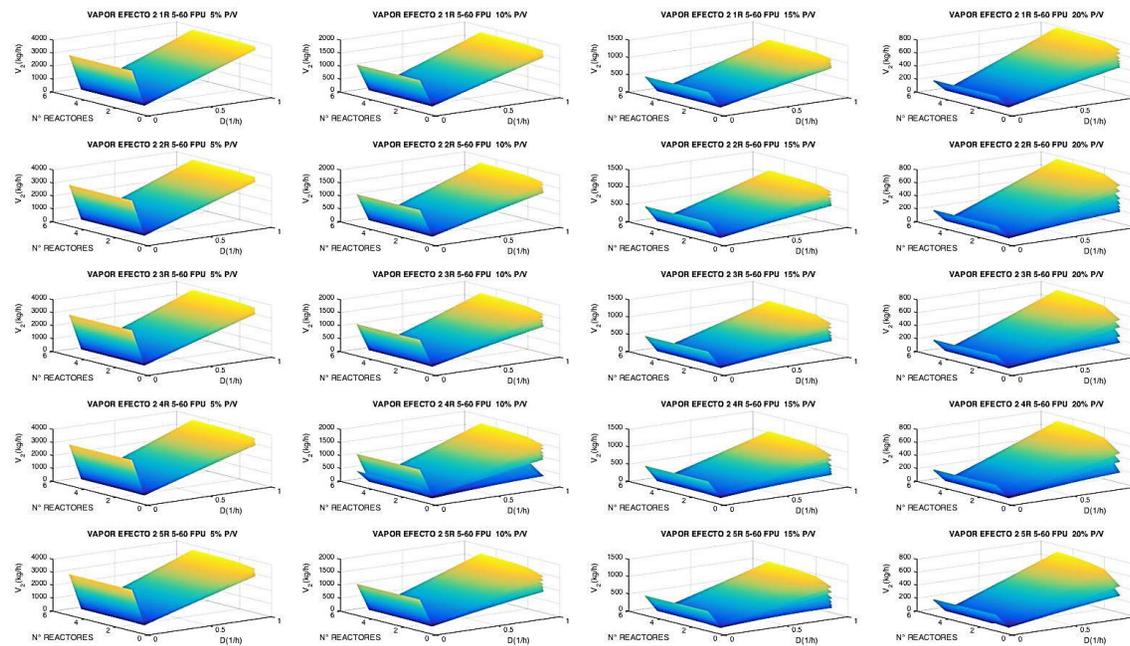


Figura A.1.1 Cantidad de vapor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

Apéndice A

A.1.2 Vapor efecto 3

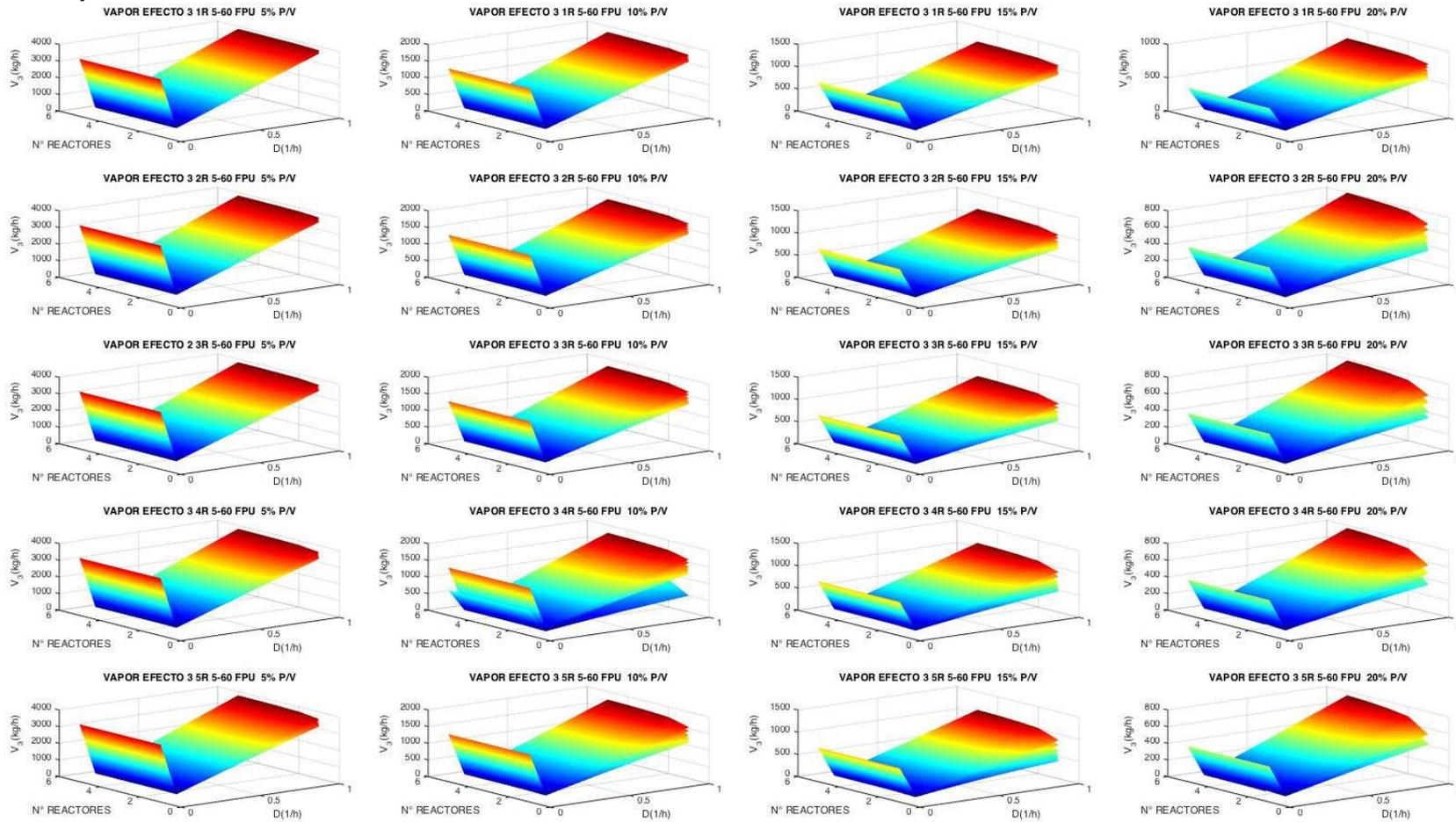


Figura A.1.2 Cantidad de vapor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

Apéndice A

A.1.3 Velocidad de transferencia de calor efecto 2

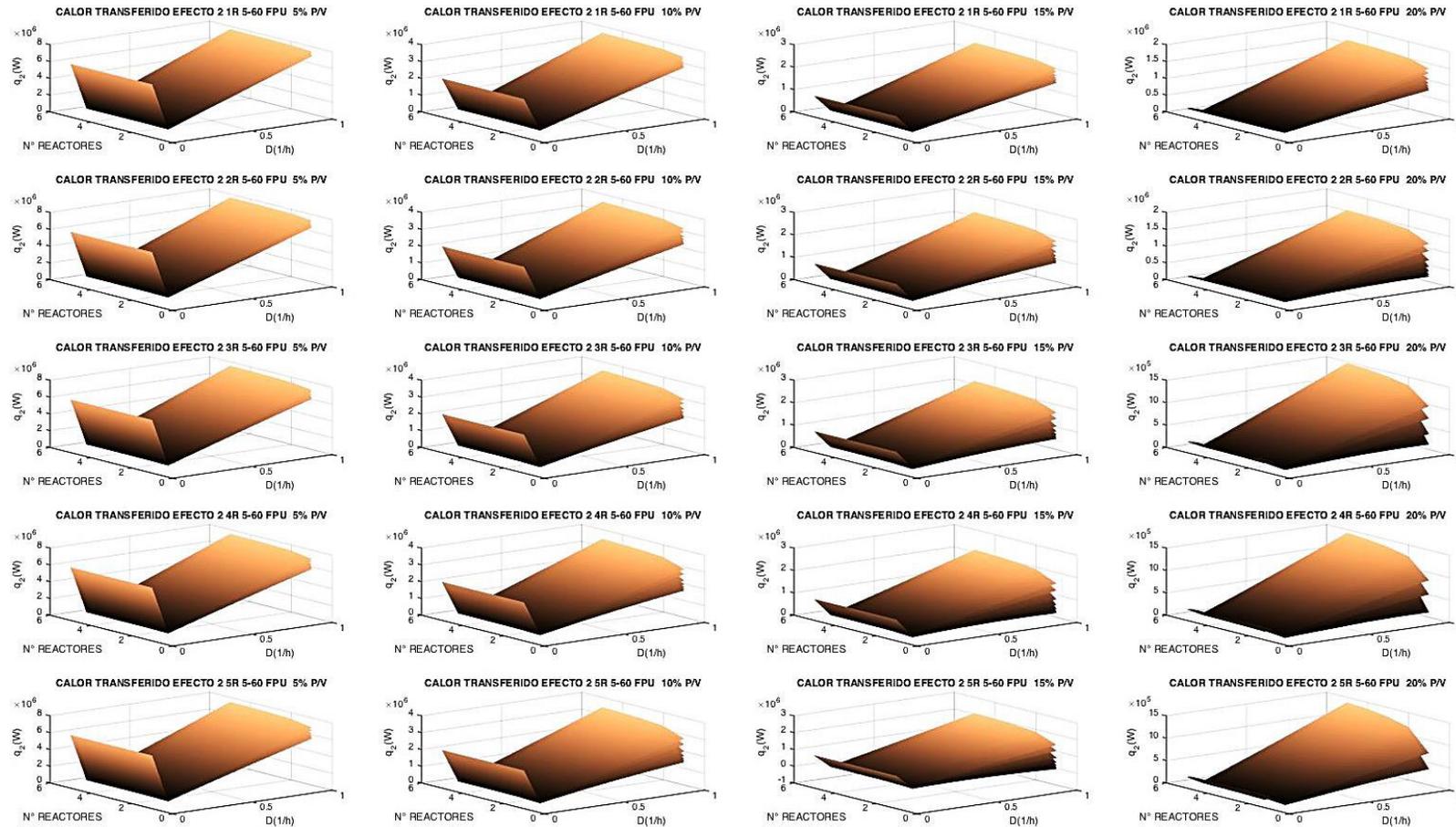


Figura A.1.3 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo.

A.1.4 Velocidad de transferencia de calor efecto 3

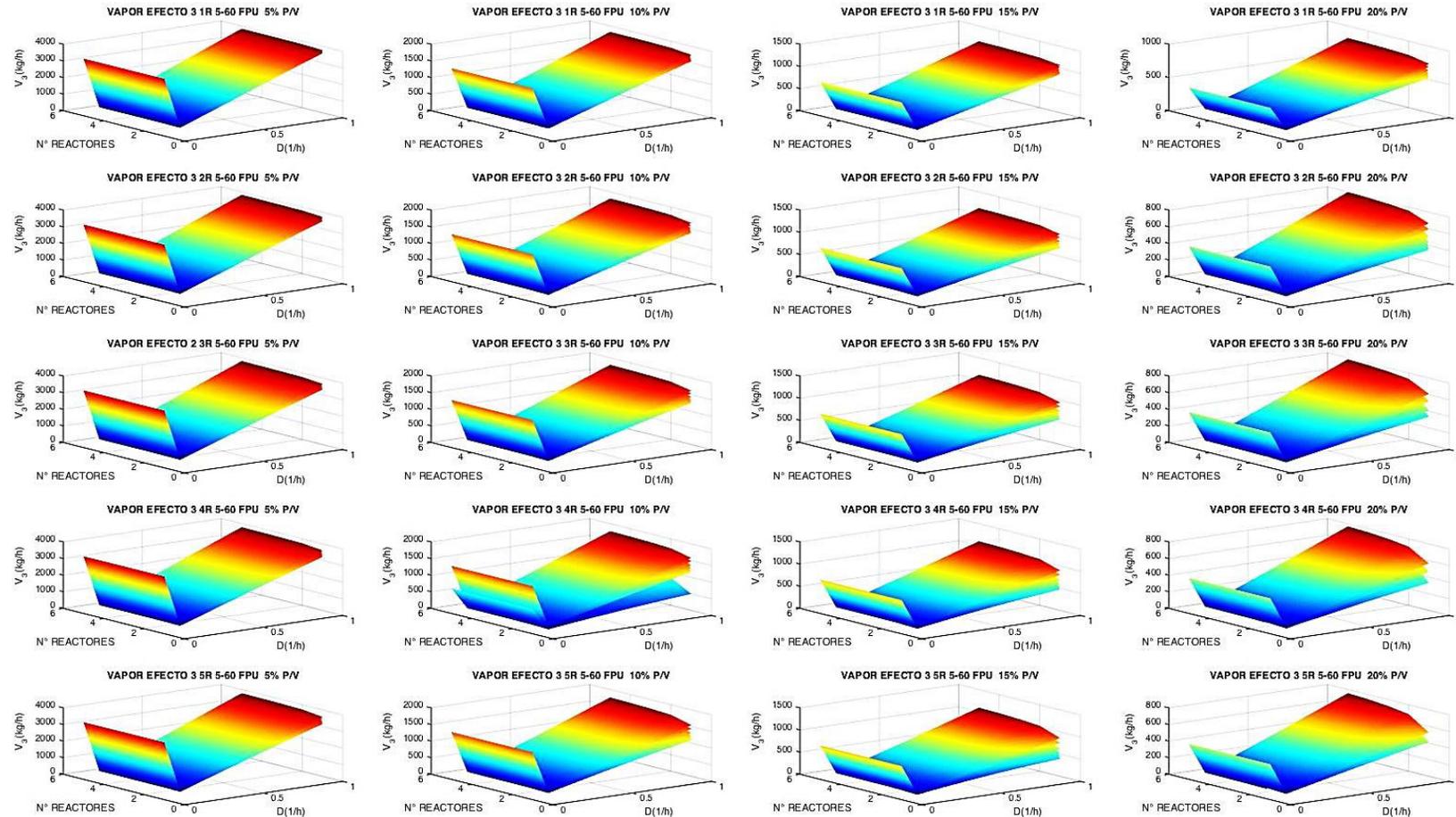


Figura A.1.4 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

Apéndice A

A.1.5 Área efecto 2

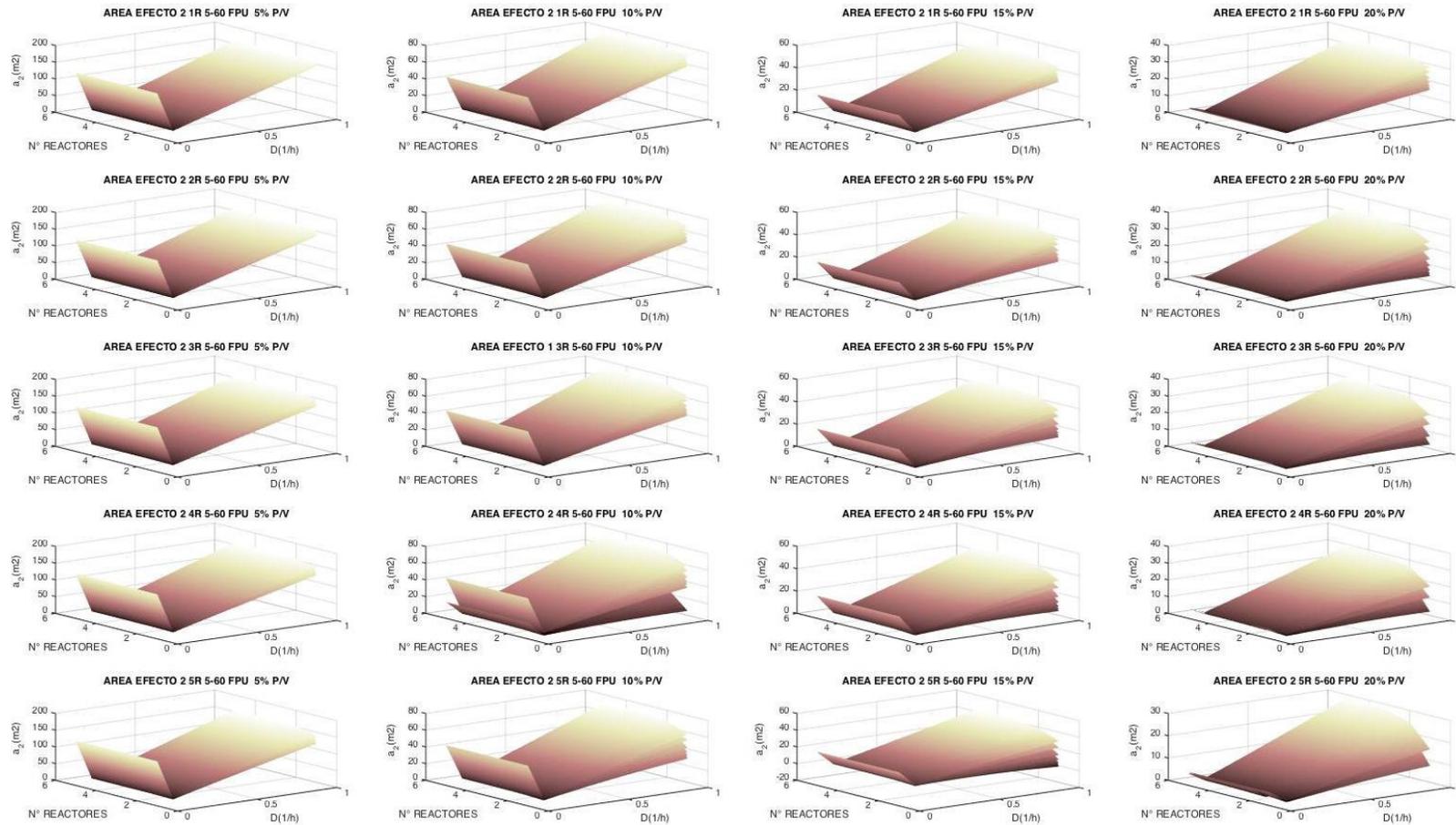


Figura A.1.5 Área en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A.1.6 Área efecto 3

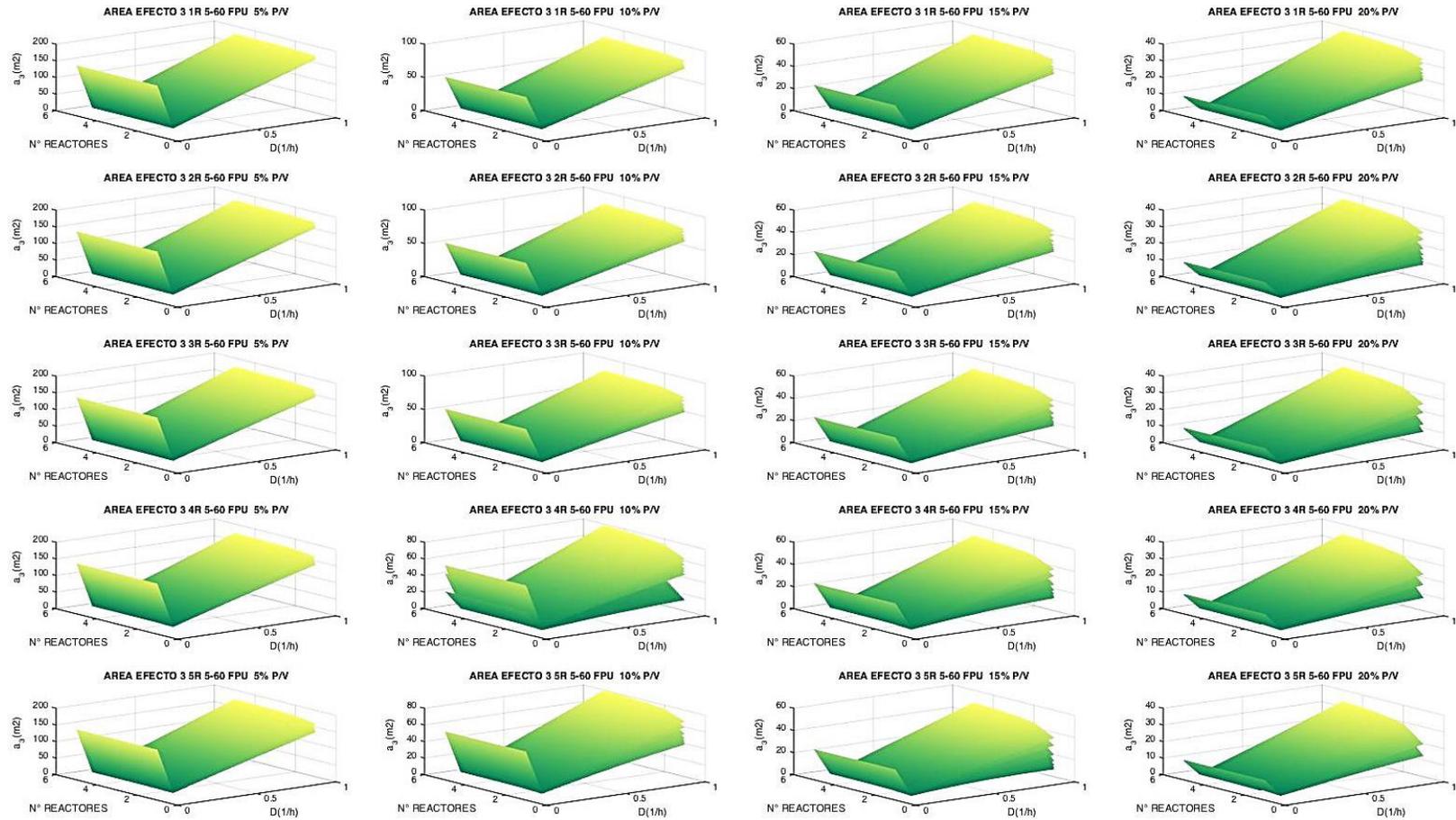


Figura A.1.6 Área en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de BCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A2. PAJA DE CAÑA DE AZÚCAR

A.2.1 Vapor efecto 2

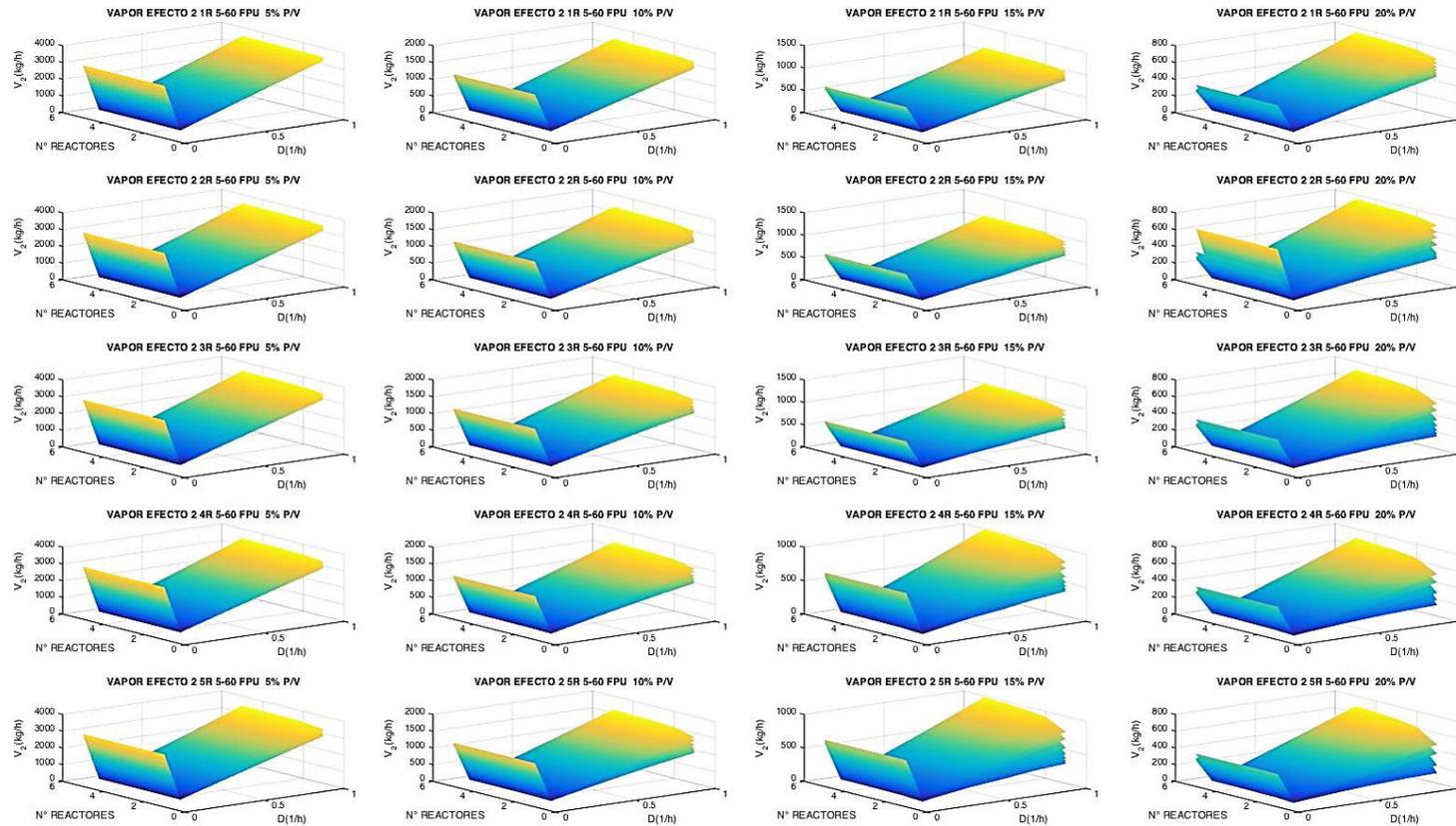


Figura A.2.1 Cantidad de vapor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A.2.2 Vapor efecto 3

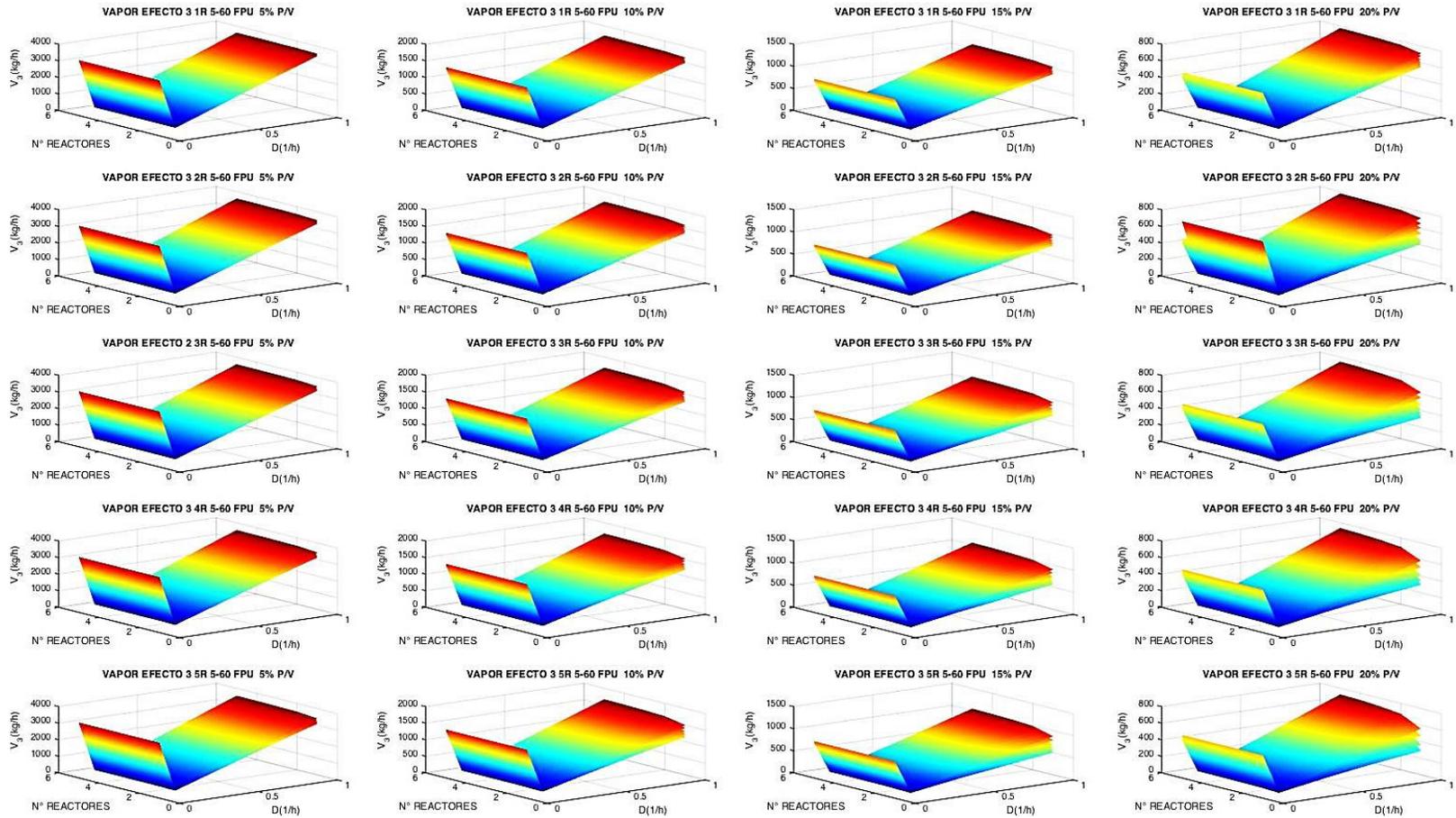


Figura A.2.2 Cantidad de vapor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

Apéndice A

A.2.3 Velocidad de transferencia de calor efecto 2

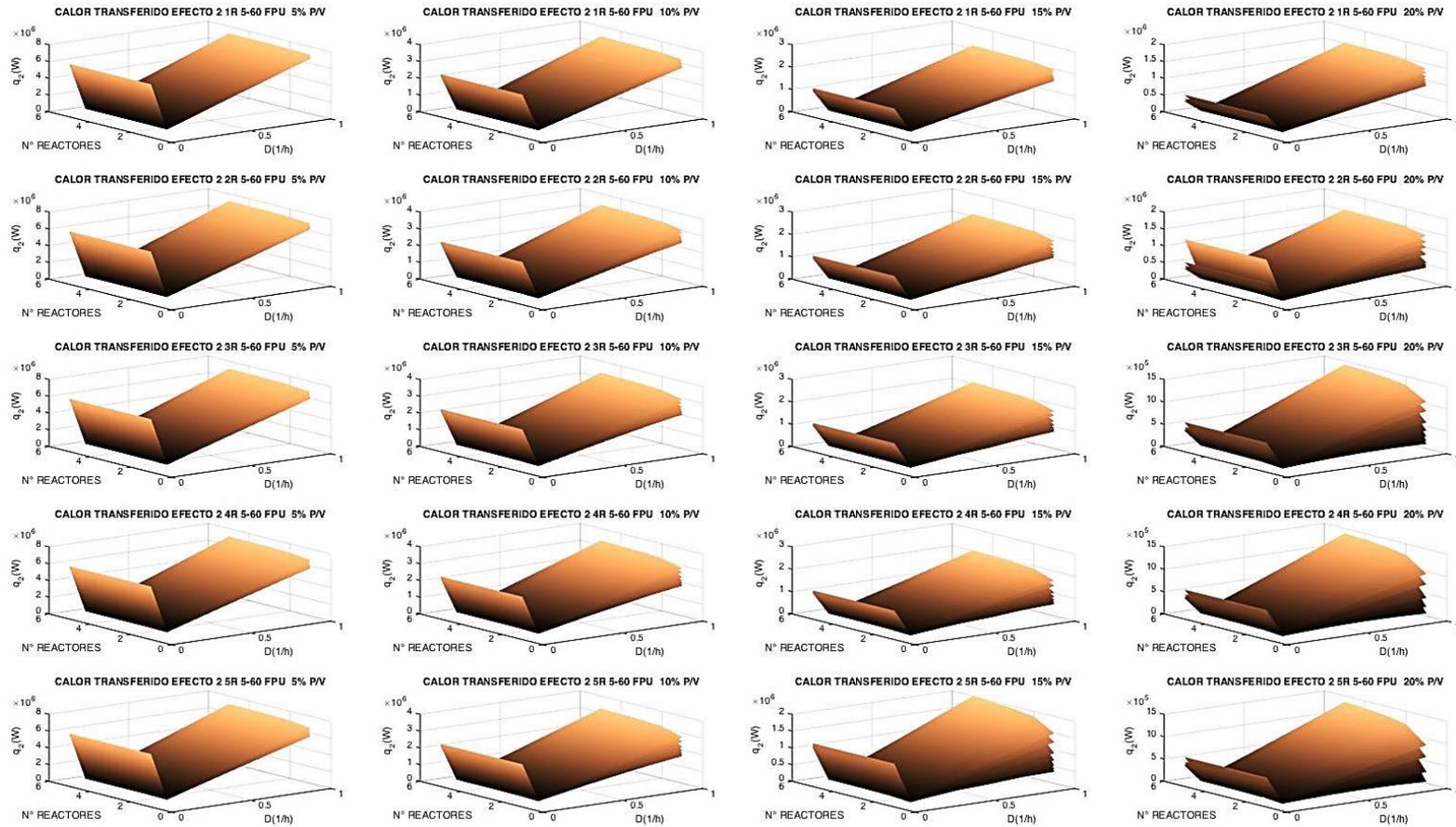


Figura A.2.3 Velocidad de transferencia de calor en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A.2.4 Velocidad de transferencia de calor efecto 3

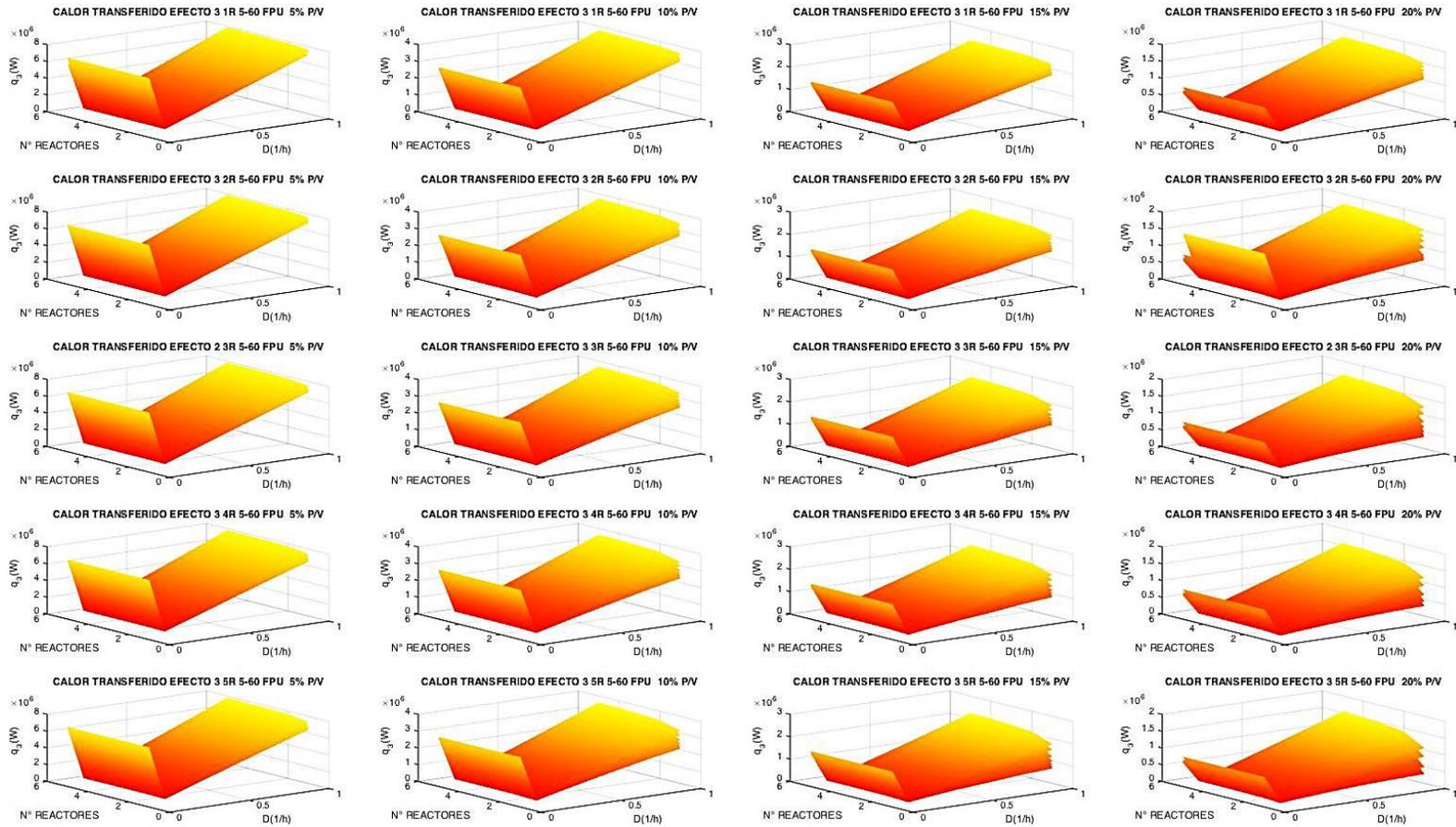


Figura A.2.4 Velocidad de transferencia de calor en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A.2.5 Área efecto 2

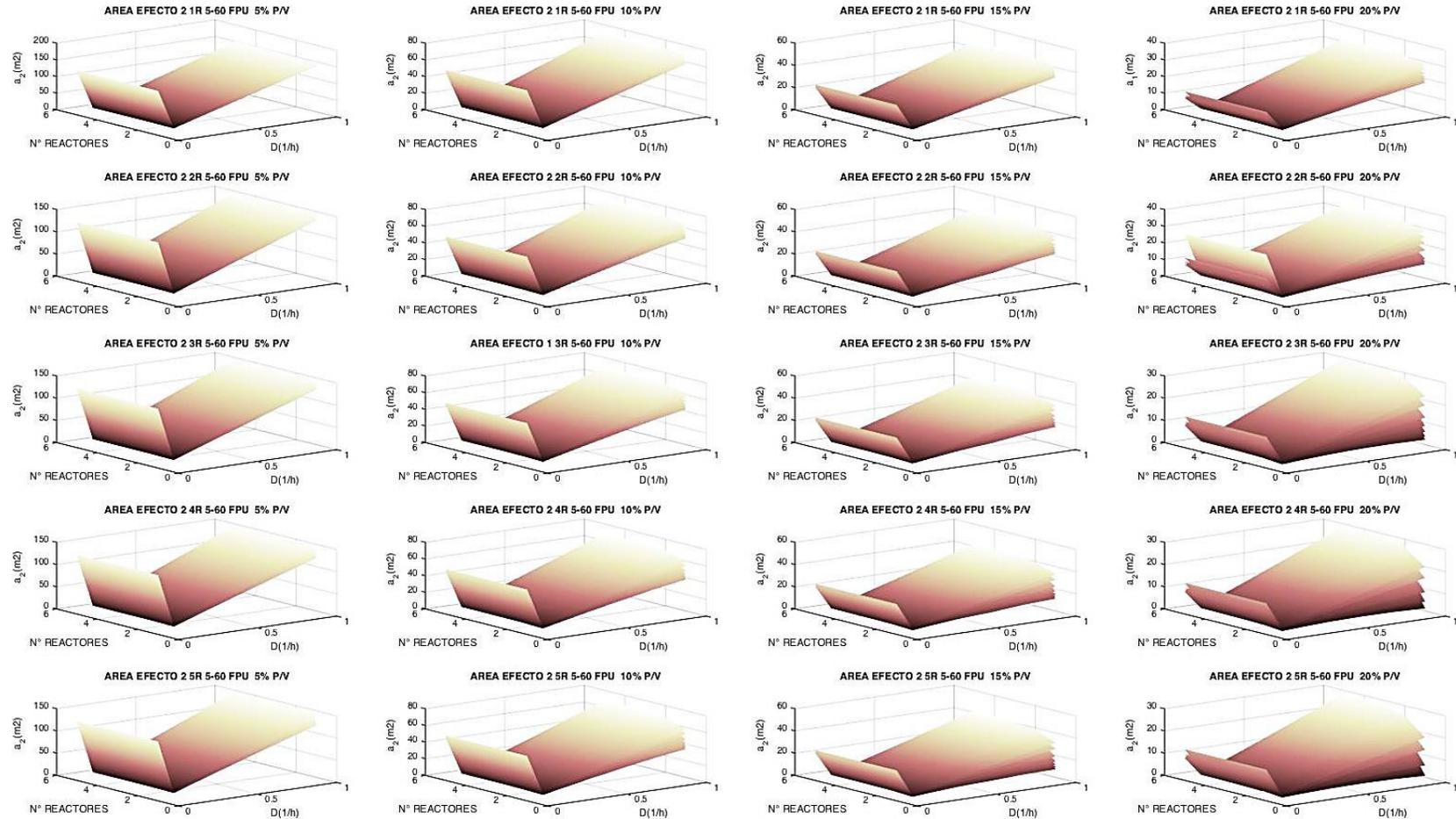


Figura A.2.5 Área en efecto 2 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

A.2.6 Área efecto 3

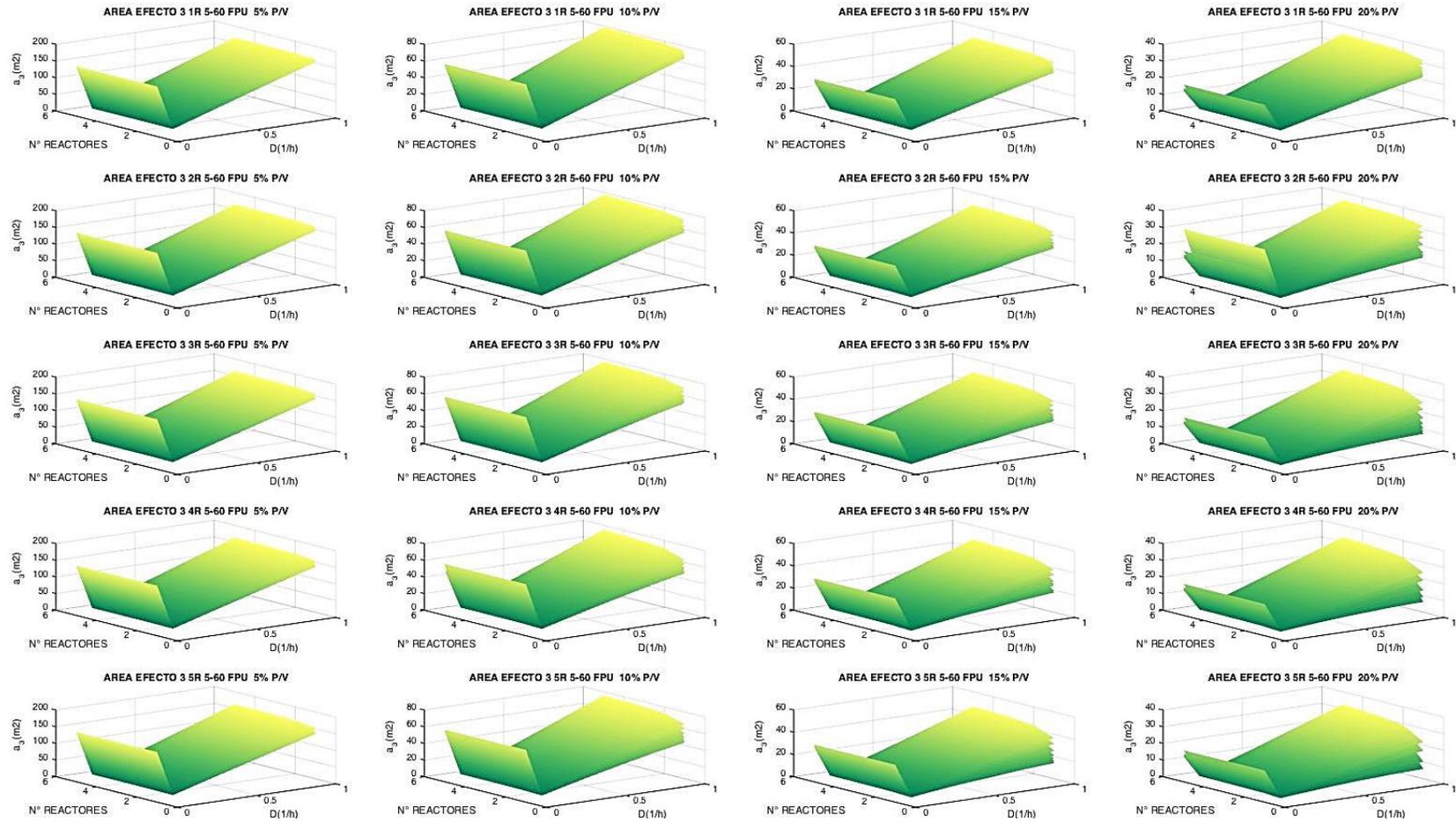


Figura A.2.6 Área en efecto 3 para cargas de 5, 10, 15 y 20% p/v de PCA, con concentraciones de 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 FPU, a velocidades de dilución de 0, 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8 y 1 1/h, para uno, dos, tres, cuatro y cinco reactores en operación en continuo

Apéndice B. Condiciones de operación de evaporadores

Tabla B.1 Condiciones de operación para evaporador de triple efecto al ser alimentado por hidrolizados provenientes de una carga de 10% p/v de BCA y PCA pretratadas con una concentración de complejo enzimático de 60 FPU con operación en lote.

	EFEECTO 1	EFEECTO 2	EFEECTO 3	Condensador
Temperatura de condensación (°C)	133.5200	118.1383	93.9941	51.6700
Temperatura en el efecto (°C)	118.4025	94.3779	52.4343	-
Entalpía de vapor saturado a temperatura de condensación (KJ/Kg)	2724.8872	2703.2447	2665.9905	2594.2392
Entalpía de líquido saturado a temperatura de condensación (KJ/Kg)	497.5289	495.9090	393.8550	-
Presión a la temperatura de condensación (Kpa)	300.5098	187.8844	81.8746	13.4913
Presión a la temperatura en el efecto (Kpa)	189.2481	82.8142	14.0127	-

Tabla B.2 Condiciones de operación para evaporador de triple efecto al ser alimentado por hidrolizados provenientes de una carga de 10% p/v de BCA y PCA pretratadas con una concentración de complejo enzimático de 60 FPU con operación en continuo a $D=0.1$ 1/h.

	EFEECTO 1	EFEECTO 2	EFEECTO 3	Condensador
Temperatura de condensación (°C)	133.5200	118.1383	93.9941	51.6700
Temperatura en el efecto (°C)	118.4025	94.3779	52.4343	-
Entalpía de vapor saturado a temperatura de condensación (KJ/Kg)	2724.8872	2703.2447	2665.9905	2594.2392
Entalpía de líquido saturado a temperatura de condensación (KJ/Kg)	497.5289	495.9090	393.8550	-
Presión a la temperatura de condensación (Kpa)	300.5098	187.8844	81.8746	13.4913
Presión a la temperatura en el efecto (Kpa)	189.2481	82.8142	14.0127	-

Referencias bibliográficas

Akgul Ozlem, Zamboni Andrea, Bezzo Fabrizio, Shah Nilay, Papageorgiou Lazaros G. (2010). Optimization-Based Approaches for Bioethanol Supply Chains. *Ind. Eng. Chem. Res.* 50, 4927–493.

Andrietta Silvio Roberto (1994). Modelagem, Simulação e Controle de Fermentação alcoólica continua em escala industrial. Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

Angarita, J. D., Souza, R. B. A., Cruz, A. J. G., Biscaia, E. C., & Secchi, A. R. (2015). Kinetic modeling for enzymatic hydrolysis of pretreated sugarcane straw. *Biochemical Engineering Journal*, 104, 10–19.

Câmara M.M., (2012). Kinetic modeling and simulation for the enzymatic hydrolysis of sugarcane bagasse pretreated by alkaline hydrogen peroxide, M. Sc. dissertation (in portuguese), Universidade Estadual de Maringá, Brazil.

Chemangattuvalappil Nishanth G. y Ng Denny K.S. (2013). A systematic methodology for optimal product design in an integrated biorefinery. *Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 23*, pp 91-96.

Cherubini Francesco and Stroemman Anders Hammer (2010). Production of Biofuels and Biochemicals from Lignocellulosic Biomass: Estimation of Maximum Theoretical Yields and Efficiencies Using Matrix Algebra. *Energy Fuels* 24, 2657–2666.

Consultado en Febrero de 2017 www.internationalagency.com

Cordeiro Mantovaneli Ivana Cristina (2005). Modelagem Híbrido Neuronal de um Processo de Fermentação Alcoólica. Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

Corsano Gabriela, Montagna Jorge M., Iribarren Oscar A., Aguirre Pío A. (2009). Mathematical Modeling Approaches for Optimization of Chemical Processes. Nova Science Publishers.

Dansereau, L. P., El-Halwagi, M., Mansoornejad, B., & Stuart, P. (2014). Framework for margins-based planning: Forest biorefinery case study. *Computers and Chemical Engineering*, 63, 34–50.

Referencias bibliográficas

Furlan Felipe Fernando, Borba Costa Caliane Bastos, Fonseca Gabriel de Castro, Soares Rafael de Pelegrini, Resende Secchi Argimiro, Gonçalves da Cruz Antonio José, Giordano Roberto de Campos (2012). Assessing the production of first and second generation bioethanol from sugarcane through the integration of global optimization and process detailed modeling *Computers and Chemical Engineering* 43 1– 9.

Furtado Júnior, J. C., Palacio, J. C. E., Leme, R. C., Lora, E. E. S., da Costa, J. E. L., Reyes, A. M. M., & del Olmo, O. A. (2019). Biorefineries productive alternatives optimization in the brazilian sugar and alcohol industry. *Applied Energy*, (December 2018), 113092.

Geankoplis C.J. (2016). *Transport Processes and Separation Process Principles*, 4th edition, Prentice Hall, Upper Saddle River.

Geraili Aryan y Romagnoli José A. (2015). A Framework for Optimal Design of Integrated Biorefineries under Uncertainty. *Chemical Engineering Transactions* Vol. 43, 2015.

Gupta, A., Verma, J.P. (2015). Sustainable bio-ethanol production from agro-residues: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 41, 550–567.

Hodge, D. B., Karim, M. N., Schell, D. J., & McMillan, J. D. (2009). Model-based fed-batch for high-solids enzymatic cellulose hydrolysis. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 152(1), 88–107.

IEA Bioenergy. (2013). Task 42 - Biorefineries: co-production of fuels, chemicals, power and materials from biomass. *IEA Bioenergy Task 42 Biorefineries*, (May).

Jong, E. de and R. van Ree (2009). Biorefineries: adding value to the sustainable utilization of biomass, www.ieabioenergy.com/LibItem.aspx?id=6420

Kadam, K. L., Rydholm, E. C., & McMillan, J. D. (2004). Development and validation of a kinetic model for enzymatic saccharification of lignocellulosic biomass. *Biotechnology Progress*, 20(3), 698–705.

Macorra, C., Brizard, A., Rincón, P., & Nieves, R. (2004). Estudio cinético de la descomposición del peróxido de hidrógeno en condiciones de extrema alcalinidad. *Tecnología y Desarrollo*, 2, 1-16.

Mansoornejad, B., Pistikopoulos, E. N., & Stuart, P. R. (2013). Scenario-based strategic supply chain design and analysis for the forest biorefinery using an operational supply chain model. *International Journal of Production Economics*, 144(2), 618–634.

Referencias bibliográficas

Meleiro L.A.C. y Filho R. Maciel (2000). State and Parameter Estimation Based a Nonlinear Filter Applied to an Industrial Process Control of Ethanol Production. Braz. J. Chem. Eng. vol.17 n.4-7.

Meléndez, P. A. (2017). Análisis del pretratamiento de bagazo de caña de azúcar para la obtención de azúcares fermentables. Guanajuato, Guanajuato, México, Universidad de Guanajuato.

Morales-Rodríguez, R., Gernaey, K. V., Meyer, A. S., & Sin, G. (2011). A Mathematical model for simultaneous saccharification and co-fermentation (SSCF) of C6 and C5 sugars. Chinese Journal of Chemical Engineering, 19(2), 185–191.

Nawaz Mehboob, Zondervan Edwin, Woodley John y Gani Rafiqul (2011). Design of an Optimal Biorefinery. 21st European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 21.

Ng, D. K. S. (2013). Automated targeting for the synthesis of an integrated biorefinery. Chemical Engineering Journal, 162(1), 67–74.

Peñaloza-Meza, V.P. (2014). Simulación y optimización de la etapa de fermentación de un sistema industrial de producción de etanol. Guanajuato, Guanajuato, México, Universidad de Guanajuato.

Pham Viet y El-Halwagi Mahmoud (2012). Process Synthesis and Optimization of Biorefinery Configurations. AIChE Journal Vol. 58, No. 4, pp. 1212-1221.

Rabelo, S. C., Filho, R. M., & Costa, A. C. (2013). Lime pretreatment and fermentation of enzymatically hydrolyzed sugarcane bagasse. Applied Biochemistry and Biotechnology, 169(5), 1696–1712.

Rizwan, M., Lee, J. H., & Gani, R. (2013). Optimal processing pathway for the production of biodiesel from microalgae biomass: A superstructure based approach. Computers and Chemical Engineering, 58, 305–314.

Souza, R. B. A. de. (2016). Estudo do pré-tratamento hidrotérmico e hidrólise enzimática da palha de cana-de-açúcar. Tese de Doutorado-UFSCar, São Carlos-SP, 124.

Summary, P. (2014). PUBLISHABLE SUMMARY KACELLE Bringing cellulosic ethanol to industrial production at Kalundborg, Denmark. (April).

Referencias bibliográficas

Tay Douglas H.S., Ng Denny K.S., Tan Raymond R. (2013). Robust Optimization Approach for Synthesis of Integrated Biorefineries with Supply and Demand Uncertainties. *Environmental Progress & Sustainable Energy* (Vol.32, No.2) DOI 10.1002/ep.

Viegas M.C., Andrietta S.R., Andrietta M.G.S. (2002). Use of Tower Reactors for Continuous Ethanol Production. *Brazilian Journal of Chemical Engineering* Vol. 19, No. 02, pp. 167 – 173.

Walter, A., & Ensinas, A. V. (2008). Combined production of second-generation biofuels and electricity from sugarcane residues. *ECOS 2008 - Proceedings of the 21st International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems*, 35(2), 1295–1302.

Zheng, Y., Pan, Z., Zhang, R., & Jenkins, B. M. (2009). Kinetic modeling for enzymatic hydrolysis of pretreated creeping wild ryegrass. *Biotechnology and Bioengineering*, 102(6), 1558–1569.

Zondervan, E., Nawaz, M., de Haan, A. B., Woodley, J. M., & Gani, R. (2011). Optimal design of a multi-product biorefinery system. *Computers and Chemical Engineering*, 35(9), 1752–1766.



COORDINACIÓN DE LOS POSGRADOS DE INGENIERÍA QUÍMICA
Oficio No. DCNE/DIQ/PIQ/054/22

DR. AGUSTÍN RAMÓN URIBE RAMÍREZ
DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
PRESENTE

Estimado doctor Uribe:

Por este medio me permito hacer constar que el trabajo de tesis del Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química, titulado "**Simulación, Diseño y Optimización de una Biorefinería Integrada para la Producción de Bioetanol de Segunda Generación**", fue desarrollado por la **C. Viviana Paloma Peñaloza Meza**, bajo la dirección de los Doctores, Héctor Hernández Escoto y Salvador Hernández Castro, siendo los sinodales propuestos para efectos del examen de grado los siguientes profesores:

PRESIDENTE: Dr. Fabricio Omar Barroso Muñoz
SECRETARIO: Dr. Ricardo Morales Rodríguez
VOCAL: Dr. Juan Carlos Torres Guzmán
VOCAL: Dr. Araceli Jacobo Azuara
VOCAL: Dr. Rafael Maya Yescas

Sin más agradezco la atención al presente, reciba un cordial saludo.

Atentamente,

"La Verdad Os Hará Libres"

Guanajuato, Gto., 30 de junio del 2022.


Dr. Ricardo Morales Rodríguez
Coordina del Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO
DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS
COORD. DEL POSGRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA

C.c.p. Archivo

CAMPUS GUANAJUATO
DIVISION DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

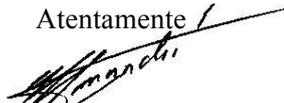
Guanajuato, Gto. a 20 de julio de 2020

*Asunto: Opinión de tesis de Viviana paloma Peñaloza Meza
hacia examen de obtención de grado de doctor*

Dr. Agustín Ramón Uribe Ramírez
Director
División de Ciencias Naturales y Exactas
Universidad de Guanajuato
Presente.

Me dirijo a Usted de la manera más atenta para hacer de su conocimiento que he revisado la tesis de doctorado de la estudiante **Viviana Paloma Peñaloza Meza**, cuyo título es **Simulación, Diseño y Optimización de una Biorefinería Integrada para la Producción de Bioetanol de Segunda Generación**. Considero que cumple satisfactoriamente con la calidad tanto en contenido como en forma para que sea defendida en correspondiente examen de obtención de grado de Doctor en Ingeniería Química.

Atentamente



Héctor Hernández Escoto
Director de Tesis de Viviana Paloma Peñaloza Meza



Dr. Héctor Hernández Escoto
Profesor Titular
Departamento de Ingeniería Química
División de Ciencias Naturales y Exactas
Universidad de Guanajuato - Guanajuato

E.mail: hhee@ugto.mx, hhee@me.com
Tel. Cel.: -473 114 3028
Tel.: (473) 7320006 x 1424
Fax.: (473) 7320006 x 8139
Dirección: Noria Alta s/n, Noria Alta. 36050, Guanajuato, Gto.

Guanajuato, Gto., 16 de julio de 2020

Dr. Agustín Ramón Uribe Ramírez
DCNE-Campus Guanajuato
Director
Presente:

Por medio de la presente le comunico que he leído y revisado la tesis en su versión final titulada **“SIMULACION, DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE UNA BIOREFINERIA INTEGRADA PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL DE SEGUNDA GENERACIÓN”** de la **M.I.Q. VIVIANA PALOMA PEÑALOZA MEZA**, por lo que no tengo ningún inconveniente en que continúe con los trámites correspondientes para el examen de obtención del grado de doctor.

Atentamente,

A handwritten signature in blue ink, consisting of a stylized, cursive script that is difficult to decipher but appears to be the name of the signatory.

Dr. Salvador Hernández Castro
Co-Director de Tesis