



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA
QUÍMICA, BIOTECNOLOGÍA
Y MATERIALES

FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

Entrega Parcial 3

Producción de Biobutanol, Bioetanol y Acetona a partir de Remolacha

Nombres: Franco Corsini
Javiera Farías
Renán Pulquillanca
Vanessa Vargas

Grupo: 3

Curso: IQ5701 – Taller de Diseño de Procesos

Profesores: Elisa Díaz
Javiera Riffo
Álvaro Olivera

Fecha: 13 de diciembre de 2018

Resumen Ejecutivo

Reservas mundiales de petróleo, gas natural y carbón se acabarán en 41, 64 y 167 años respectivamente. Frente a esta problemática, el proyecto se enmarca en la búsqueda de una solución sustentable que permita producir butanol, etanol y acetona, aprovechando como materia prima las más de 5.000 hectáreas de remolacha sin uso que dejó el cierre de la planta IANSA en Linares.

El objetivo general de este proyecto es diseñar el proceso productivo de biocombustibles a partir de remolacha y evaluarlo bajo los tres ejes de la sustentabilidad (económico, ambiental y social). En particular, los objetivos específicos para este informe son presentar la organización de la empresa, describir en detalle el proceso productivo, realizar los balances de masa y dimensionar los equipos necesarios para producir el biobutanol.

A partir del caso base de 651.396 toneladas de remolacha anuales disponibles, se tiene la producción de 37 metros cúbicos de etanol y 87 m³ de butanol por ciclo batch. El proceso se divide en tres etapas principales: pretratamiento de remolacha, fermentación de azúcares y purificación de productos. Los equipos destacados de cada etapa son: reactor de hidrólisis enzimática, reactor de fermentación y pervaporador de triple efecto, cuyas dimensiones son:

Equipo	Parámetro	Dimensión
Reactor enzimático	Volumen	3.819 [m ³]
Reactor de fermentación	Volumen	5.000 [m ³]
Pervaporador	Área de membrana	742 [m ²]

En relación con los objetivos propuestos, se logra presentar el proyecto de producción de biobutanol y su organización. De igual manera, se plantea el diagrama del proceso realizado en el programa AutoCAD®, que se corrigió respecto de la entrega anterior al cambiar la etapa de decantación por la pervaporación. Finalmente, se tiene para el balance de masa del sistema una pérdida del 0,71%, asociada a la omisión de la producción de lactato en la fermentación. Respecto del dimensionamiento de los equipos, aquellos que pueden diferir de lo requerido en la realidad pueden ser las torres de destilación, principalmente a causa de que se utiliza el método de McCabe – Thiele para la determinación de platos.

Tabla de contenido

1.	Introducción.....	5
1.1	Contexto y justificación del proyecto	5
1.2	Objetivos	5
1.3	Presentación de la organización	5
1.3.1	Misión	5
1.3.2	Visión	6
2.	Desarrollo	6
2.1	Caso Base	6
2.2	Límite de batería	6
3.	Descripción del proceso	6
4.	Balances de masa	8
5.	Dimensionamiento de equipos	9
6.	Conclusiones	10
7.	Referencias	11
8.	Anexos	14
8.1	Nomenclatura.....	14
8.2	Memoria de cálculo del caso base.....	19
8.2.1	Cálculo de caso base máximo	19
8.2.2	Aporte estimado a la matriz energética.....	19
8.3	Límite de Batería	21
8.4	Diagrama de Bloques.....	22
8.5	Balance de Masas	24
8.5.1	Balance en el equipo de Conminución.....	24
8.5.2	Balance en el difusor	24
8.5.3	Balance en el Intercambiador de Calor	25
8.5.4	Balance en el Reactor de Hidrólisis Enzimática	25
8.5.5	Balance en el Filtro.....	26
8.5.6	Balance en el Reactor de Cultivo de Bacterias	26
8.5.7	Balance en el Fermentador	27
8.5.8	Balance en el Tamiz Rotatorio	29

8.5.9	Balance en el pervaporador	29
8.5.10	Balance en el condensador	30
8.5.11	Balance en las Torres de destilación	31
8.6	Dimensionamiento rodillos de molienda (HPGR).....	35
8.7	Dimensionamiento del difusor	37
8.8	Dimensionamiento del intercambiador de calor.....	42
8.9	Simulación de la hidrólisis y dimensionamiento del reactor enzimático.....	45
8.10	Diseño del filtro prensa.....	48
8.11	Simulación cinética de crecimiento en cultivo de bacterias	51
8.11.1	Código Matlab, programa principal de ejecución.....	51
8.11.2	Balance de glucosa y microorganismos	51
8.11.3	Resultados de simulación de cultivo de bacteria <i>Clostridium acetobutilycum</i>	52
8.12	Dimensionamiento de reactor de cultivo	52
8.13	Leyes Cinéticas en Fermentación ABE	54
8.14	Código Matlab y resultados de simulación de la fermentación.	56
8.14.1	Programa principal de ejecución	56
8.14.2	Velocidades cinéticas y balances de masa en Matlab.....	57
8.15	Dimensionamiento del fermentador	59
8.16	Dimensionamiento del pervaporador	61
8.17	Dimensionamiento de las torres de destilación	66
8.18	Carta Gantt.....	70

Índice de Ilustraciones

Ilustración 1: Diagrama de flujos compacto del proceso.....	7
Ilustración 2: Balance de masa Global	9
Ilustración 3: Límite de Batería	21
Ilustración 4: Diagrama actual de la producción de bioetanol, biobutanol y acetona mediante Fermentación ABE, junto con sus respectivos flujos.	22
Ilustración 5: Diagrama de bloques del proceso de la entrega anterior.....	23
Ilustración 6: Esquema de una torre de destilación.	31
Ilustración 7: Zonas de conminución en un equipo HPGR y las variables a considerar en el dimensionamiento del diámetro (D) del rodillo. [29]	35
Ilustración 8: Mecanismo de reacción de la hidrólisis de la sacarosa mediante invertasa (también conocida como sacarasa), propuesto en [19].	45
Ilustración 9: Concentración de sacarosa, glucosa y fructosa en función del tiempo.	46
Ilustración 10: Resultados de simulación en cultivo de crecimiento de microorganismos.	52
Ilustración 11: Resultados de Simulación Fermentación ABE, Concentración inicial de glucosa 100 [g/l].	59
Ilustración 12: Pervaporación de ABE.....	61
Ilustración 13: Equilibrio Etanol-Acetona y rectas de operación.....	66
Ilustración 14: Método McCabe Thiele para torre 1.....	67
Ilustración 15: Equilibrio Etanol-Butanol y rectas de operación.....	68
Ilustración 16: Método McCabe Thiele para torre 2.....	69

Índice de tablas

Tabla 1: Justificación y dimensionamiento de los equipos principales del proceso.....	9
Tabla 2: Datos bibliográficos para el cálculo de caso base.	19
Tabla 3: Datos bibliográficos estimación aporte energético.	19
Tabla 4: Balance de masa por especie en conminución.	24
Tabla 5: Balance de masa por especie en difusor.	24
Tabla 6: Balance de masa en I.C.....	25
Tabla 7: Masa de entrada y salida del reactor de hidrólisis enzimática.	25
Tabla 8: Balance de masa en filtro.	26
Tabla 9: Balance de masa en fermentador.	28
Tabla 10: Balance en el tamiz rotatorio.	29
Tabla 11: Balance de masa en el pervaporador.....	30
Tabla 12: Balance de masa en el condensador.....	30
Tabla 13: Condiciones en torre de destilación 1.....	32
Tabla 14: Presión de vapor de componentes	33
Tabla 15: Condiciones en torre de destilación 2.....	34
Tabla 16: Balance de masa difusor.	39
Tabla 17: Propiedades agua de calefacción.....	40
Tabla 18: Propiedades suspensión de pulpa.....	40
Tabla 19: Propiedades I.C. de placas.....	41
Tabla 20: Balance de masa I.C.....	42
Tabla 21: Propiedades agua refrigerante.....	43
Tabla 22: Propiedades suspensión de pulpa.....	43
Tabla 23: Datos filtro prensa.....	49
Tabla 24: Variables diseño filtro.	50
Tabla 25: Balance de masa en pervaporador.....	62
Tabla 26: Carta Gantt del Proceso	70

Documentos adjuntos

Planilla en formato <i>Excel</i> de balance de masa y dimensionamiento.....	EP3_BMD.xlsx
Diagrama de flujos de <i>AutoCAD</i>	Diagrama.pdf

1. Introducción

1.1 Contexto y justificación del proyecto

El biobutanol y bioetanol son biocombustibles que pueden obtenerse de diversas materias primas orgánicas como maíz, remolacha, entre otras. En particular, se pueden producir ambos en un mismo proceso mediante Fermentación ABE¹, que también produce Acetona.

Estos dos biocombustibles son carbono neutral, es decir, el CO₂ emitido en su combustión es aquel que la biomasa absorbió para su crecimiento; a diferencia de los combustibles fósiles, cuyo carbono proviene del subsuelo y tarda miles de años en reabsorberse [1]. Cabe destacar que el biobutanol es de particular interés, debido a que puede mezclarse en mayor proporción con la gasolina [2] en comparación a los otros biocombustibles. En Chile, el uso de biocombustibles recae principalmente en la generación de energía eléctrica a partir de biogás, cuya oferta aumentó en 2,1% el año 2016 [3].

La Fermentación ABE requiere de glucosa para producir butanol, etanol y acetona. Ésta se puede obtener a partir de la remolacha, planta que se cultiva en grandes cantidades en la Región del Maule. El 26 de julio del 2018 se anunció el cierre de la Planta Linares IANSA[4] y como consecuencia cerca de 4 mil trabajadores se verán afectados y alrededor de 5 mil hectáreas de remolacha quedarán sin destino al no ser procesadas en azúcar[5]. En este contexto, se observa la posibilidad de ser pioneros en el país en la producción de biobutanol y bioetanol, y de promover el empleo en la región.

1.2 Objetivos

El objetivo general de este proyecto es el diseño del proceso productivo de biocombustibles a partir de remolacha, acompañado de una evaluación económica, ambiental y social.

Los objetivos específicos para este informe son: presentar el proyecto, incluyendo misión y visión de la organización; describir el proceso, junto con su caso base y límite de batería, diagrama de flujos de AutoCAD®, balance de masa del proceso y el dimensionamiento de los equipos.

1.3 Presentación de la organización

Este proyecto se desarrolla bajo el concepto de biorrefinería², y así ser un proceso rentable y sustentable. En este sentido, abarcará los principales ejes de la sustentabilidad: otorgando trabajo a personas afectadas por el cierre de IANSA Linares, produciendo un producto con potencial rentabilidad [6] y disminuyendo la emisión de gases de efecto invernadero en la refinación del combustible, en comparación a los hidrocarburos [7]. La planta de producción estará ubicada en las antiguas instalaciones de IANSA, en las afueras de la ciudad de Linares.

Se venderá los biocombustibles a través de una alianza con Copec S.A., ya que posee el 58% del mercado de combustibles a nivel país y ha declarado un compromiso con sus emisiones, vendiendo bonos de carbono de diversas plantas sustentables de generación de energía, entre ellas una de biomasa[8][9].

1.3.1 Misión

Somos una empresa energética en alianza con Copec S.A., que contribuye a un mundo más sostenible a través de la producción de biocombustibles. Nos caracterizamos por ser innovadores, al ser la primera planta en Chile; sustentables, al producir combustible con menor emisión de gases contaminantes; y eficientes, al reducir los costos energéticos y de materia prima.

¹ Fermentación llevada a cabo por bacterias de tipo *Clostridium*, siendo productos la acetona, butanol y etanol.

² Instalaciones que de un modo sostenible transforman biomasa en un amplio espectro de productos energéticos, alimentos, piensos, fertilizantes y bioproductos.

1.3.2 Visión

Ser líder en Chile y Latinoamérica del suministro de biocombustibles de primera generación, e incentivar el desarrollo de tecnologías para aumentar su producción a partir de biomasa.

2. Desarrollo

2.1 Caso Base

La capacidad productiva del proceso se estima según la materia prima disponible. Según esto, el caso base se determina bajo los siguientes supuestos:

- La materia prima (remolacha) proviene exclusivamente de las 5.714 hectáreas que quedan sin destino productivo tras el cierre de la Planta IANSA Linares [5].
- La capacidad productiva en Chile es de 114 toneladas de remolacha por hectárea cosechada [5].
- La cosecha de remolacha es anual [10].

De este modo, el máximo de procesamiento anual queda determinado por 651.396 toneladas de remolacha. La cantidad de remolacha a tratar por batch (2.998 [ton]) se determinó en base al requerimiento de glucosa del equipo de fermentación. Así, para procesar el caso base se requiere de 218 ciclos batch por año.

Finalmente, la producción es de 8150,82[m³] de etanol y 8.850,62[m³] de butanol a partir de 651,396 [ton] de remolacha, logrando reemplazar un 2,2 % de la gasolina consumida en Chile por mezcla alcohol-gasolina (ver Anexo 8.2).

2.2 Límite de batería

Materias primas e insumos: La remolacha es despachada por los agricultores y entra entera y limpia al proceso [11]. Las enzimas entran en polvo [12]. El ácido acético y butírico ingresan puros en estado líquido [13]. Por último, las bacterias y su sustrato entran en mezcla acuosa.

Subproductos: El agua residual del proceso se derivará a una empresa externa para su tratamiento, cuyas instalaciones serán aledañas a la planta de biocombustibles, y posteriormente será distribuida a agricultores socios de la empresa a través de un sistema de canales de regadío. El CO₂ será vendido a empresas de alimentos [14]. Los residuos de pulpa serán vendidos para generar alimento para animales, y en el caso de que la demanda sea inferior a la producción, el excedente será donado a una planta de biogás que será implementada por la Municipalidad de Talca [15][16].

Productos: La acetona será vendida a la industria química en bidones. El butanol y etanol se almacenarán en estanques determinados, cargándose en camiones condicionados de la empresa COPEC para su transporte a los clientes.

Esta sección se esquematiza de manera resumida en el Anexo 8.3.

3. Descripción del proceso

El diagrama del proceso completo se muestra en la Ilustración 2 Ilustración 1. La primera fase del proceso es el pretratamiento de la remolacha. Mediante rodillos de conminución HPGR³ y adición de agua se transforma la remolacha en una suspensión sólido-líquido con partículas del orden de 8 [mm] de diámetro [17]. Esta mezcla se lleva al reactor de hidrólisis enzimática (mediante la acción de la enzima

³ High Pressure Grinding Rolls: Rodillos de molienda de alta presión.

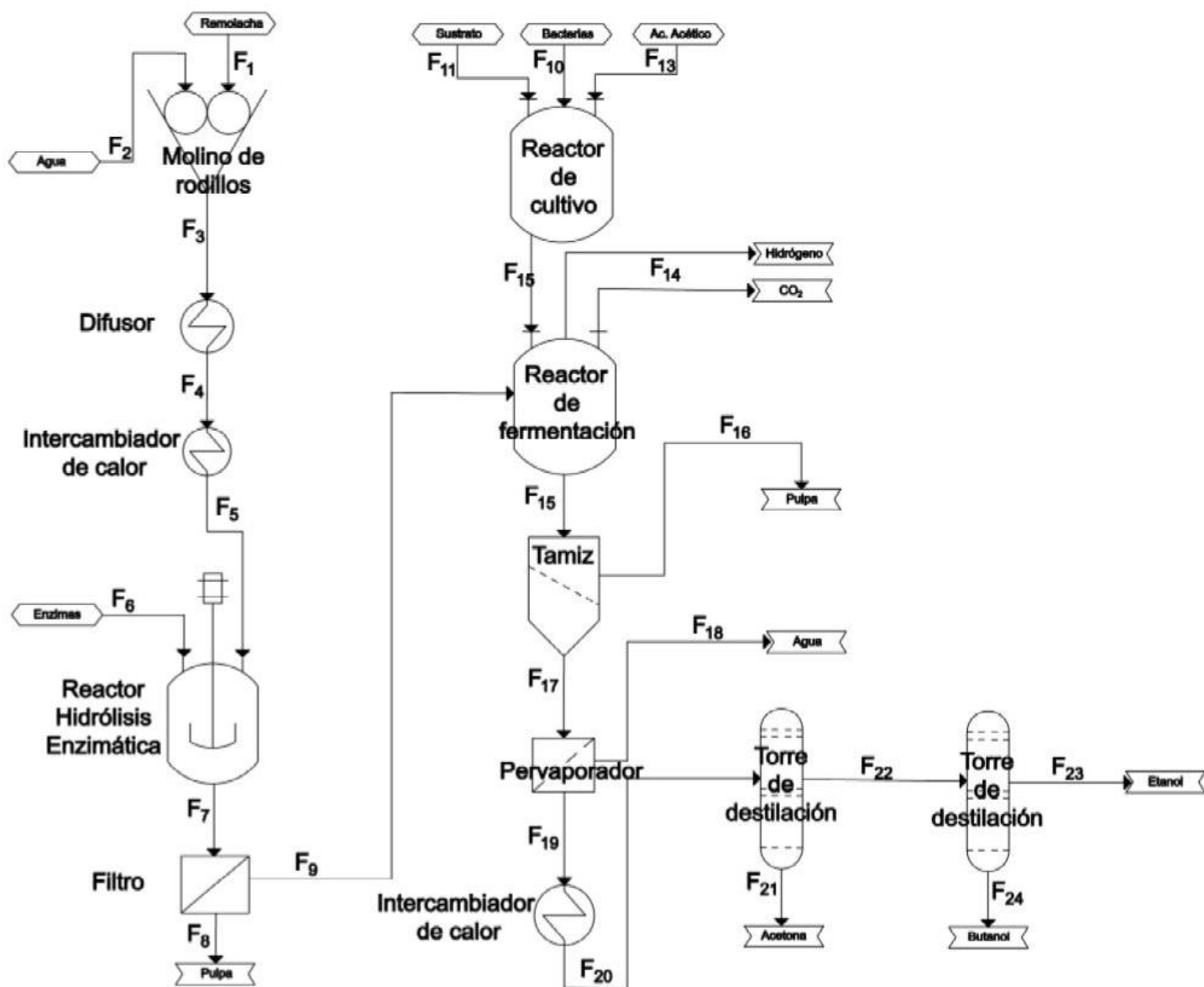


Ilustración 1: Diagrama de flujos compacto del proceso.

invertasa⁴), con el objetivo de producir glucosa a partir de la sacarosa. Cabe mencionar que queda una fracción de sacarosa sin hidrolizar. Posteriormente, los líquidos hidrolizados son separados del material sólido por medio de un filtro.

Paralelamente, se realiza el crecimiento de microorganismos *Clostridium acetobutylicum*⁵ con la adición de glucosa como sustrato, para obtener 50 [kg] de bacterias. Esta mezcla rica en glucosa y bacterias entra al fermentador, donde también se agregan reactivos como ácido acético y ácido butírico, para aumentar las concentraciones finales de los productos y atenuar la inhibición de bacterias por butanol [18]. La salida del reactor es una mezcla de acetona, butanol, etanol, agua, sacarosa, restos de materia orgánica provenientes de las bacterias y de pulpa de remolacha.

Sigue la fase de purificación de los productos. Primero la mezcla líquida pasa por un tamizado, donde se separan la pulpa de remolacha remanente y los restos de bacterias provenientes del fermentador. Luego pasa por un proceso de pervaporación, que tiene dos flujos de salida: uno de vapor de agua, y otro de ABE líquido concentrado. El vapor de agua pasa por un condensador, saliendo del proceso como agua líquida. Por otro lado, el ABE es llevado a una primera torre de destilación para separar la acetona de la mezcla, cuya cola ingresa a una segunda torre, que separa el etanol del butanol.

4. Balances de masa

La Ilustración 2 **Error! No se encuentra el origen de la referencia.** muestra el balance de masa global del proceso. El detalle del balance de cada operación unitaria se presenta en la sección 0 de Anexos. Las composiciones de los flujos de salida de los reactores se definen en base a sus simulaciones, ver el Anexo 8.9 para el reactor de hidrólisis, Anexo 8.11 para el reactor de cultivo de bacterias y Anexos 8.13 y 8.14 para el fermentador. Se destaca que la emisión de CO₂ es aproximadamente 15% menos que la refinería de gasolina, detallada en Anexo 8.5.7.

El supuesto más importante para la fase de pretratamiento se tiene en la hidrólisis enzimática, donde se asume que la cinética de la reacción se representa por un modelo de inhibición por sustrato que incorpora como factores limitantes los efectos del agua retenida por la sacarosa, lo que produce que ésta se comience a aglomerar [19]. Esto hace sentido considerando la estructura molecular de las sustancias involucradas, pues al no haber agua disponible, las moléculas de sacarosa pueden formar puentes de hidrógeno entre ellas, lo que dificultaría su disolución, y luego su hidrólisis.

En la fase de fermentación, el supuesto más fuerte corresponde a las relaciones estequiométricas de salida presentadas en el Anexo 8.5.7 [20], que es responsable del mayor error dentro del balance de masa global. Se encontró en [21] que en la ruta metabólica que origina la producción también se produce lactato, el que no se considera como producto en [20], por lo que se asume que el error se da principalmente a causa de esa omisión en la salida del fermentador.

Para la purificación, el principal supuesto es la simplificación de los sistemas para las curvas de los destiladores. Para la primera torre en particular, se asumió que el sistema estaba compuesto principalmente por acetona y etanol, despreciando el aporte del butanol. Pese a que éste se encuentra en mayor cantidad que el etanol, sus fuerzas intermoleculares son menores (debido a su estructura), lo que es más relevante al momento de hablar del equilibrio líquido-vapor.

⁴ También llamada Sacarasa, enzima que produce la hidrólisis de la sacarosa para formar glucosa y fructosa.

⁵ Microorganismo anaeróbico utilizado para la fermentación, generando productos como acetona, butanol y etanol.

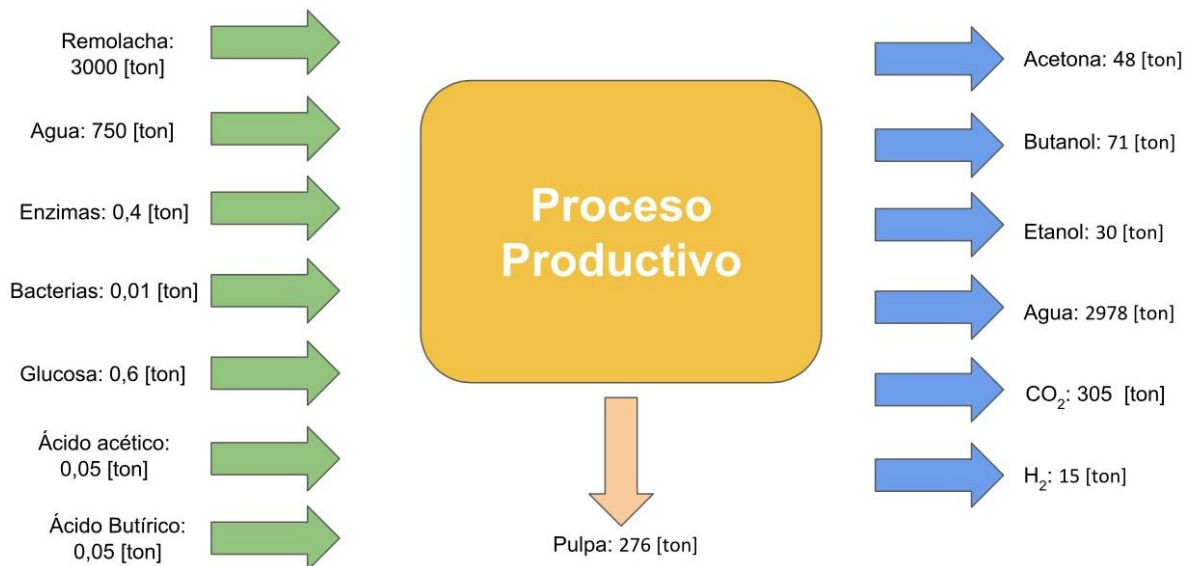


Ilustración 2: Balance de masa Global

El error del balance de masa global es de un 0,71%. Se atribuye, según ya se comentó, a la omisión por parte de la bibliografía utilizada a la producción de lactato en la fermentación, y en menor medida, a la determinación gráfica de las concentraciones de salida de cada destilador (ver Anexo 8.17).

5. Dimensionamiento de equipos

Los equipos dimensionados son: molino de conminución (en Anexo 8.6), difusor (Anexo 8.7) intercambiador de calor (Anexo 8.8), reactor enzimático (Anexo 8.9), filtro prensa (Anexo 8.10), reactor de cultivo de bacterias (Anexo 8.12), reactor de fermentación (Anexo 8.15), pervaporador (Anexo 8.16) y dos torres de destilación (Anexo 8.17).

Tabla 1: Justificación y dimensionamiento de los equipos principales del proceso.

Equipo	Justificación	Dimensiones
Molino de conminución	Reduce de tamaño de la remolacha (genera mezcla de jugo y pulpa).	Diámetro de rodillos: 11,2 [m]
Difusor	Aumenta la temperatura de la remolacha molida, favoreciendo la difusión de la sacarosa a la solución.	Área de transferencia: 179,7 [m ²] Número de placas: 107
Intercambiador de calor	Disminuye la temperatura de la mezcla hasta la de operación del reactor de hidrólisis.	Área de transferencia: 74,5 [m ²] Número de placas: 45
Reactor enzimático	Mediante la enzima sacarasa se convierte la sacarosa de la remolacha en glucosa.	Volumen: 3819 [m ³] Diámetro: 11,7 [m] Altura: 35,2 [m]
Filtro prensa	Reduce la pulpa presente en la solución.	Área total de transferencia: 6302,6 [m ²]
Reactor de cultivo de bacterias	Se propicia el crecimiento de la población de bacteria <i>Clostridium acetobutylicum</i> .	Volumen: 5 [m ³] Diámetro: 1,29 [m] Altura: 3,8 [m]

Reactor de fermentación	Mediante la bacteria se producen los productos principales a partir de glucosa.	Volumen: 5000 [m ³] Diámetro: 12,9 [m] Altura: 38,6 [m]
Pervaporador	Mediante 3 membranas en serie, separa agua de la solución.	Área de cada membrana: 742,1 [m ²]
Torre de destilación 1	Separa principalmente la acetona de la mezcla ABE	N° de platos: 14 más reboiler Altura: 6,75 [m]
Torre de destilación 2	Separa principalmente el etanol del butanol.	N° de platos: 7 más reboiler Altura: 3,6 [m]

Se destaca de los resultados obtenidos que las dimensiones de los reactores de hidrólisis y fermentación, así como del área característica del filtro son del orden de miles de [m³] y [m²], respectivamente, lo que se condice con los volúmenes de producción. Además, que el diámetro de los rodillos creció un 300% respecto a la entrega anterior y se disminuyó a una unidad de intercambiador de calor, gracias a la realización de carta Gantt explicitada en Anexo 8.18

De esta sección, el dimensionamiento de las torres de destilación puede presentar mayor error en cuanto al cálculo de los platos de cada una, en primer lugar, porque se usó el método de McCabe – Thiele para obtenerlos. Éste requiere que las sustancias a separar tengan calores de vaporización similares, y al ser de 592, 846 y 518 [kJ/kg] para el butanol, etanol y acetona, respectivamente [22][23], no se cumple para el etanol al ser alrededor de un 55% mayor. Y, en segundo lugar, porque las composiciones de salida se determinan gráficamente, luego no se tiene su valor exacto. Esto incide en la entrada de la segunda torre, lo que puede afectar al cálculo del número de platos de ésta.

En el Anexo 8.4 se muestra el diagrama de bloques actual del proceso, y aquel presentado en la entrega anterior. Los principales cambios realizados consisten en el reemplazo del autoclave por un difusor para la liberación de la sacarosa a la solución, principalmente porque se requerían alrededor de 150 autoclave, mientras que ahora se requiere solo un equipo para ello. También se cambió el decantador gravitatorio por un pervaporador para separar agua de la mezcla, debido a que éste es más eficiente y requiere menos supuestos fuertes, pues anteriormente se omitía los efectos de la solubilidad del butanol en la solución, siendo ésta importante (60 [g/L][24]).

6. Conclusiones

En relación con los objetivos propuestos, se logra presentar el proyecto de producción de biobutanol y su organización. De igual manera, se plantea el diagrama del proceso realizado en el programa AutoCAD®, que se corrigió respecto de la entrega anterior al cambiar la etapa de decantación por la pervaporación.

En cuanto a los errores que se pueden presentar en el desarrollo de este informe, se tiene para el balance de masa del sistema una pérdida del 0,71%, asociada a la omisión de la producción de lactato en la fermentación, y en menor medida, a determinar de forma gráfica las concentraciones de salida de cada destilador. Respecto del dimensionamiento de los equipos, aquellos que pueden diferir de lo requerido en la realidad pueden ser las torres de destilación, principalmente a causa de que se utiliza el método de McCabe – Thiele para la determinación de platos. Este método asume que las sustancias a separar tienen calores de vaporización similares, sin embargo, el etanol difiere de los otros componentes en aproximadamente un 55%.

Se proyecta para la próxima entrega agregar un proceso para la separación de gases, de manera que sean productos con valor para vender a industrias: el CO₂ para industrias de alimentos, y el H₂ como biocombustible. Por otro lado, se proyecta anexar un análisis social, de la mano de la Herramienta de Análisis Integral (HAIN), así como definir la Responsabilidad Social Empresarial (RSE) de la Organización.

7. Referencias

- [1] “¿Es realmente la biomasa neutra en emisiones de carbono? - IMARTEC - Servicios energéticos.” [Online]. Available: <https://www.imartec.es/es-realmente-la-biomasa-neutra-en-emisiones-de-carbono/>. [Accessed: 12-Oct-2018].
- [2] Manuel Antonio Rey Pérez, “Estado del arte de la producción de Biocombustibles avanzados en la Unión Europea,” *Dep. Ing. Química y Ambient. Univ. Sevilla*, 2014.
- [3] CNE, “Anuario Estadístico De Energía 2017,” p. 145, 2018.
- [4] PULSO, “Directorio de Iansa decide cerrar la planta de Linares,” 2018. .
- [5] P. M. Michels, “El amargo negocio del azúcar en Chile: Productores enfrentan incierto panorama ante eventual cierre de Iansa en Linares.” .
- [6] Zion Market Research, “No Title,” *Bio-Butanol Market: Global Industry Analysis, Size, Share, Growth, Trends, and Forecasts 2018–2024*, 2018. [Online]. Available: https://www.zionmarketresearch.com/report/bio-butanol-market#utm_source=kavita%2F21sept&utm_medium=ref.
- [7] L. Pinilla, “Análisis de tendencias en biocombustibles para la definición de líneas estratégicas de investigación y desarrollo en Colombia,” p. 34, 2013.
- [8] copec, “Copec,” 2018. [Online]. Available: <https://ww2.copec.cl>. [Accessed: 20-Nov-2018].
- [9] copec, “Huella COPEC,” 2013. [Online]. Available: <https://ww2.copec.cl/huella/huellacopec>.
- [10] “Remolacha Y Achicoria , Temporada Contratación,” 2011.
- [11] E. M. S.A.P., “Productores azucareros enfrentan incierto panorama ante eventual cierre de Iansa en Linares | Emol.com,” 2018.
- [12] S. A. BIOCON ESPAÑOLA, “Ficha de seguridad BIOINVERT P CONC,” vol. 2006, no. 1907, pp. 1–17, 2017.
- [13] “Cellulase from *Trichoderma reesei* aqueous solution, ≥ 700 units/g | Sigma-Aldrich.” .
- [14] R. C. S. ARAVENA, “Estudio exploratorio de producción de bioetanol y de coproductos de biorefinería a partir de residuos de eucalipto,” 2010.
- [15] D. El Centro, “Municipio implementará planta de compostaje para generar biogás y energíaMunicipio implementará planta de compostaje para generar biogás y energía,” 2018. [Online]. Available: <http://www.diarioelcentro.cl/noticias/cronica/municipio-implementara-planta-de-compostaje-para-generar-biogas-y-energia>.
- [16] Nutrition. Inc., “Wha at Is Beet Pulp ?” pp. 1–2.
- [17] Fundación Española para el Desarrollo de la Nutrición Animal, “Pulpa de Remolacha,” 2012. [Online]. Available: http://www.fundacionfedna.org/ingredientes_para_piensos/pulpa-de-remolacha-actualizado-nov-2012. [Accessed: 13-Nov-2018].
- [18] H. I. Velázquez-Sánchez and R. Aguilar-López, “Novel kinetic model for the simulation analysis of the butanol productivity of *Clostridium acetobutylicum* ATCC 824 under different reactor configurations,” *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 26, no. 4, pp. 812–821, 2018.
- [19] L. Bowski, R. Saini, D. Y. Ryu, and W. R. Vieth, “Kinetic modeling of the hydrolysis of sucrose by invertase,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 13, no. 5, pp. 641–656, 1971.
- [20] T. Lütke-Eversloh and H. Bahl, “Metabolic engineering of *Clostridium acetobutylicum*: Recent advances to improve butanol production,” *Curr. Opin. Biotechnol.*, vol. 22, no. 5, pp. 634–647, 2011.
- [21] J. J. J. Obando and C. a Cardona, “Analysis of the production of biobutanol in the acetobutylc

fermentation with clostridium saccharoperbutylacetonicum N1-4 ATCC13564,” *Análisis la Prod. biobutanol en la Ferment. acetobutílica con clostridium saccharoperbutylacetonicum N1-4 ATCC13564*, no. 58, pp. 36–45, 2011.

- [22] Basf Petronas Chemicals, “Technical Leaflet Petrochemicals: n-BUTANOL,” no. January, pp. 1–4, 2006.
- [23] E. ToolBox, “Fluids - Latent Heat of Evaporation,” 2003. [Online]. Available: https://www.engineeringtoolbox.com/fluids-evaporation-latent-heat-d_147.html.
- [24] C. Roth, “Ficha de datos de seguridad 1-Butanol ROTISOLV®,” vol. 2006, no. 1907. pp. 1–17, 2017.
- [25] “Comunicado-Inventarios-Combustibles-2018_02_02.” .
- [26] U. N. A. de México, “Hoja de seguridad etanol,” vol. 53, no. 2. pp. 139–144, 2016.
- [27] F. Química and N. O. C. H. Oh, “ACIDO PERCLORICO (60 – 70 %) N ° CAS : 7601-90-3 Resumen de Datos de Seguridad y Factores de Riesgo en el Manejo de Sustancias Químicas Resumen de Datos de Seguridad y Factores de Riesgo en el Manejo de Sustancias Químicas,” no. 2, pp. 3–4.
- [28] B. L. Bursten, *Química la ciencia central*. 2004.
- [29] T. Para, O. Al, G. D. E. Magíster, E. N. Ciencias, and D. E. L. A. Ingeniería, “MODELACIÓN Y SIMULACIÓN DE MOLIENDA CON RODILLOS A ALTA PRESIÓN – HPGR,” 2010.
- [30] A. M. Domingo and A. M. Domingo, *Apuntes de Mecánica de Fluidos*, vol. 1.0.1. Madrid: Universidad Politécnica de Madrid, 2011.
- [31] KWS Chile Ltda., “Objetivos de mejora vegetal en la Remolacha Azucarera: Rendimiento.” [Online]. Available: <https://www.kws.cl/aw/objetivos/remolacha-azucarera/rendimiento/~djjj/>. [Accessed: 13-Nov-2018].
- [32] “SKIL - How Sugar Beet Is Made.” [Online]. Available: <http://www.sucrose.com/lbeet.html>. [Accessed: 09-Dec-2018].
- [33] A. VELÁZQUEZ LÓPEZ, “Xv.- transmisión de calor por convección correlaciones para la convección forzada,” pp. 223–245.
- [34] T. Amalgamated, “Evaporator Heat Transfer Coefficients for Beet Sugar Solution,” 1964.
- [35] D. E. Propiedades, “Tablas y diagramas de propiedades (sistema internacional).”
- [36] A. Jea, S. Vanni, and B. a Green, “Ch a p t e r 93,” vol. 086, pp. 305–329, 1910.
- [37] “Industrial Stainless Steel Plate Heat Exchanger Price - Buy Plate Heat Exchanger,Stainless Steel Heat Exchanger,Industrial Heat Exchanger Price Product on Alibaba.com.” [Online]. Available: https://www.alibaba.com/product-detail/Industrial-stainless-steel-Plate-heat-exchanger_60719307032.html. [Accessed: 15-Nov-2018].
- [38] “Asme Ss304 Stainless Steel Plate Type Heat Exchanger For Industry - Buy Asme Heat Exchanger,Stainless Steel Heat Exchanger,Ss304 Stainless Steel Plate Heat Exchanger Product on Alibaba.com.” [Online]. Available: https://www.alibaba.com/product-detail/ASME-SS304-Stainless-Steel-Plate-type_1012785957.html. [Accessed: 15-Nov-2018].
- [39] E. Lienqueo, “Clase 2- Centrifugación,” p. 55, 2018.
- [40] “Density: Sugarbeet pulp, dry, and links to volume/weight conversions.” [Online]. Available: <https://www.aqua-calc.com/page/density-table/substance/sugarbeet-blank-pulp-coma-and-blank-dry>. [Accessed: 18-Nov-2018].
- [41] “SUCROSE | CAMEO Chemicals | NOAA.” [Online]. Available: <https://cameochemicals.noaa.gov/chemical/12695>. [Accessed: 18-Nov-2018].

- [42] "ICSC 0865 - GLUCOSE." [Online]. Available: http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_version=2&p_card_id=0865. [Accessed: 18-Nov-2018].
- [43] N. Arslan and F. Kar, "Filtration of sugar-beet pulp pectin extract and flow properties of pectin solutions," *J. Food Eng.*, vol. 36, pp. 113–122, 1998.
- [44] "Automatic Pp Membrane Filter Press For Sugar Beet Pulp - Buy Filter Press For Sugar Beet Pulp,Membrane Filter Press For Sugar Beet Pulp,Sugar Beet Pulp Filter Press Product on Alibaba.com." [Online]. Available: https://www.alibaba.com/product-detail/Automatic-PP-membrane-filter-press-for_60592037650.html?s=p. [Accessed: 18-Nov-2018].
- [45] E. S. Tarleton, R. J. Wakeman, and Institution of Chemical Engineers (Great Britain), *Solid/liquid separation : equipment selection and process design*. Butterworth-Heinemann, 2007.
- [46] H. W. Yen and R. J. Li, "The effects of dilution rate and glucose concentration on continuous acetone-butanol-ethanol fermentation by *Clostridium acetobutylicum* immobilized on bricks," *J. Chem. Technol. Biotechnol.*, vol. 86, no. 11, pp. 1399–1404, 2011.
- [47] R. Fox, "Acetone-Butanol-Ethanol Fermentation by Engineered *Clostridium beijerinckii* and *Clostridium tyrobutyricum*," vol. 5, no. 1976, pp. 265–288, 2010.
- [48] "Etanol Alcohol fermentación, acero inoxidable tanque de fermentación del alcohol," 2018. [Online]. Available: <https://spanish.alibaba.com/product-detail/Alcohol-ethanol-fermenter-stainless-steel-alcohol-60154713123.html?spm=a2700.7724838.2017115.173.2b725d32m0TC1s>. [Accessed: 10-Oct-2018].
- [49] M. Lienqueo, "No Title," in *Diseño de Bioreactores, Introducción, Fermentación e Ingeniería Metabólica,Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas*, Santiago de Chile, 2018.
- [50] S. Claes, P. Vandezande, S. Mullens, K. De Sitter, R. Peeters, and M. K. Van Bael, "Preparation and benchmarking of thin film supported PTMSP-silica pervaporation membranes," *J. Memb. Sci.*, vol. 389, pp. 265–271, 2012.
- [51] B. del C. N. de Chile, "APRUEBA DEFINICIONES Y ESPECIFICACIONES DE CALIDAD PARA LA PRODUCCIÓN, IMPORTACIÓN, TRANSPORTE, ALMACENAMIENTO, DISTRIBUCIÓN Y COMERCIALIZACIÓN DE BIOETANOL Y BIODIESEL," *Artículo 4*, 2008. .
- [52] A. Kujawska, J. Kujawski, M. Bryjak, and W. Kujawski, "ABE fermentation products recovery methods - A review," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 48, no. August, pp. 648–661, 2015.

8. Anexos

8.1 Nomenclatura

Simbología Griega	Unidad	Variables
α	[]	Ángulo de rotación
β	[m/kg]	Resistencia específica de torta
β_0	[m/kgPa ^s]	Coeficiente de resistencia específico
η_1	[%]	Factor de eficiencia de biomasa
η_2	[%]	Factor de eficiencia de butanol
η_3	[%]	Factor de eficiencia de ácido butírico
η_4	[%]	Factor de eficiencia de acetona
η_5	[%]	Factor de eficiencia de ácido acético
η_6	[%]	Factor de eficiencia de etanol
$\mu_{m\acute{a}x}$	[1/h]	Velocidad específica máxima de crecimiento
μ	[Pa s]	Viscosidad del fluido
ρ	[ton/m ³]	Densidad
ρ_a	[kg/m ³]	Densidad del agua
ρ_g	[kg/m ³]	Densidad de la glucosa
ρ_{sac}	[kg/m ³]	Densidad de la sacarosa
ρ_{sp}	[kg/m ³]	Densidad de la suspensión de pulpa
ρ_{lig}	[kg/m ³]	Densidad de la fase ligera
ρ_{pes}	[kg/m ³]	Densidad de la fase pesada

Simbología	Unidad	Variable
A	[m ²]	Área
A	[m ²]	Área de un filtro prensa
A_p	[m ²]	Área de placa en I.C.
A_t	[m ²]	Área total de intercambio de calor
Ace	[g/l]	Concentración de acetona

Act	[g/l]	Concentración ácido acético
$AP_{m,but}$	[%]	Aporte mezcla butanol-gasolina en matriz energética.
$AP_{m,et}$	[%]	Aporte mezcla etanol-Diesel en matriz energética.
But	[g/l]	Concentración de butanol
C	[kg/m ³]	Masa de torta por volumen filtrado
CG	[m ³]	Consumo semanal de Diesel en Chile
CG	[m ³]	Consumo semanal de gasolina en Chile
$c_{p,a}$	[j/kg°C]	Calor específico del agua
$c_{p,sp}$	[j/kg°C]	Calor específico suspensión de pulpa suspendida
CP	[ton/ha]	Capacidad productiva de remolacha
CR	[ton]	Consumo anual de remolacha en el proceso
D	[m]	Diámetro
E_0	[mg/L]	Concentración inicial de enzima (invertasa)
E_f	-	Eficiencia del filtro prensa
G^*	[ton/h]	Flujo de remolacha requerido por fermentación
G_R	[ton/h]	Flujo de remolacha para molienda
H	[ha]	Hectáreas de remolacha disponibles
h	[m]	Altura
h_a	[W/m ² °C]	Coeficiente convectivo local del agua en I.C.
h_{sp}	[W/m ² °C]	Coeficiente convectivo local de la suspensión de pulpa en I.C.
k	[m ²]	Coeficiente de Ley de Darcy
k_a	[W/m°C]	Conductividad térmica del agua
k_{ac}	[W/m°C]	Conductividad térmica del acero inoxidable
k_{AA}	[g/l]	Constante de afinidad ácido acético-acetona
k_{But}	[g/l]	Constante inhibición de crecimiento por butanol
k_d	[1/h]	Velocidad específica de muerte de células
k_2	[mol/mol]	Constante de la hidrólisis enzimática
K_S	[L/mol]	Constante de formación de complejo activo enzima-sustrato
K_t	[L/mol]	Constante de formación de complejo inactivo enzima-sustrato
K_t'	[L/mol]	Constante de inhibición de la enzima 1
K_S'	[L/mol]	Constante de inhibición de la enzima 2
l_t	[m]	Ancho de lecho (torta)

l_p	[m]	Largo transversal de placa del I.C.
L	[m]	Largo
L_p	[m]	Largo de placa del I.C.
m	[ton]	Masa
m_{in}	[ton]	Masa entrada equipo de conminución
m_{out}	[ton]	Masa salida equipo de conminución
m'_a	[kg/s]	Flujo másico de agua refrigerante
m'_{sp}	[kg/s]	Flujo másico de suspensión de pulpa caliente
m_{H_2O}	[ton]	Masa de agua
m_R	[ton]	Masa de remolacha
$m_{R\ molida}$	[ton]	Masa ed remolacha molida
N_{cb}	-	N° de ciclos batch por año
$N_{I.C.}$	-	N° de intercambiadores de calor I.C.
N_p	-	N° de placas totales
$Nu_{a,x}$	-	N° de Nusselt del agua según distancia entre placas del I.C.
$n_{p,max}$	-	N° máximo de placas por I.C.
NC	-	N° de cosechas de remolacha anuales.
P_{but}	[ton]	Producción anual de butanol
P_{et}	[ton]	Producción anual de etanol
Pr_a	-	N° de Prandtl del agua.
PV_{but}	[m ³]	Producción volumétrica anual de butanol
PV_{et}	[m ³]	Producción volumétrica anual de etanol
$PV_{m,but}$	[m ³]	Producción volumétrica anual de mezcla butanol-gasolina.
$PV_{m,et}$	[m ³]	Producción volumétrica anual de mezcla etanol-Diesel
Q_{sp}	[W]	Transferencia de calor en la suspensión de pulpa.
r	[m]	Vector de posición
$Re_{a,x}$	-	N° de Reynolds del agua según distancia entre placas del I.C.
R_c	[1/m]	Resistencia de torta
R_m	[1/m]	Resistencia del medio filtrante
RB	[%]	Reemplazo volumétrico de butanol en gasolina
RE	[%]	Reemplazo volumétrico de etanol en gasolina

S	—	Sacarosa
s		Factor de compresibilidad
s_0	[m]	Gap entre rodillos
Sac	[mol/L]	Concentración de sacarosa
Sb	[g/l]	Concentración de ácido butírico
S_g	[g/l]	Concentración de glucosa
$T_{a,in}$	[°C]	Temperatura de entrada del agua en I.C.
$T_{a,out}$	[°C]	Temperatura de salida del agua en I.C.
ΔT_{agua}	[°C]	Diferencia temperatura del agua en el I.C.
ΔT_{ml}	[°C]	Diferencia temperatura media logarítmica en I.C.
$T_{sp,in}$	[°C]	Temperatura de entrada de la suspensión pulpa en I.C.
$T_{sp,out}$	[°C]	Temperatura de salida de la suspensión pulpa en I.C.
ΔT_{sp}	[°C]	Diferencia de temperatura de la suspensión de pulpa en I.C.
t	[s]	Tiempo
t_{res}	[s]	Tiempo de residencia del líquido en el decantador
U	[m/s]	Velocidad angular de rodillos
U_c	[W/m ² °C]	Coeficiente global de transferencia de calor en I.C.
V	[m ³]	Volumen
v	[m/s]	Tasa de filtrado
v_a	[m/s]	Velocidad del agua en I.C.
V	[m ³]	Volumen de reactor
V_t	[m ³]	Volumen total de torta
v_{maxAce}	[1/h]	Velocidad específica de producción máxima de acetona
v_{maxAct}	[1/h]	Velocidad específica de producción máxima de ácido acético
v_{maxBut}	[1/h]	Velocidad específica de producción máxima de butanol
v_{maxEt}	[1/h]	Velocidad específica de producción máxima de etanol
v_{maxSb}	[1/h]	Velocidad específica de producción máxima de ácido butírico
v'_a	[m ³ /s]	Flujo volumétrico del agua en I.C.
v'_{sp}	[m ³ /s]	Flujo volumétrico de la suspensión de pulpa en I.C.
$\frac{[W_F]}{[W]}$	—	Razón de agua libre en solución
Δx	[m]	Espesor de placa del I.C.

x	[m]	Distancia entre placas del I.C.
X	[g/l]	Concentración de biomasa
Y_{AceSg}	[g/g]	Rendimiento de acetona por glucosa
Y_{ButSb}	[g/g]	Rendimiento de butanol por ácido butírico
Y_{ButSg}	[g/g]	Rendimiento de butanol por glucosa
Y_{EtSg}	[g/g]	Rendimiento etanol por glucosa
Y_{XSg}	[g/g]	Rendimiento de biomasa por glucosa
Z_{A1}	[m]	Altura de la interfase
Z_{A2}	[m]	Altura del rebosadero de la fase pesada
Z_T	[m]	Altura total de líquido en el decantador

8.2 Memoria de cálculo del caso base

8.2.1 Cálculo de caso base máximo

Según la bibliografía especificada se tienen los siguientes datos:

Tabla 2: Datos bibliográficos para el cálculo de caso base.

H	Hectáreas de remolacha.	5.714 [ha] [11]
CP	Capacidad productiva de remolacha.	114 [ton/ha] [11]
NC	Número de cosechas anuales.	1 [10]

De este modo, el consumo anual de remolacha se define por,

$$CR = H \cdot CP \cdot NC = 5.714[ha] \cdot 114 \left[\frac{ton}{ha} \right] \cdot 1 = 651.396 [ton/año]$$

Ecuación 1: Consumo anual de remolacha.

Según el balance de pasa, cada ciclo batch logra consumir 2998,74 hectáreas de remolacha, considerando este valor, se calcula el número de ciclos batch necesarios para abarcar la totalidad del caso base.

$$N_{rcb} = \frac{651.396 \left[\frac{ton}{años} \right]}{2998,74 \left[\frac{ton}{batch} \right]} \approx 218 \left[\frac{batch}{año} \right]$$

Ecuación 2: Número total de ciclos batch necesarios

8.2.2 Aporte estimado a la matriz energética

Tabla 3: Datos bibliográficos estimación aporte energético.

RB	Reemplazo volumétrico de butanol en gasolina.	16% [2]
RE	Reemplazo volumétrico de etanol en Diesel.	5% [2]
CG	Consumo semana de bencina en chile.	247.000 [m ³] [25]

Se considera que el tiempo de un ciclo corresponde al tiempo de operación del fermentado, sincronizando la totalidad de las otras operaciones dentro de este tiempo. Por otra parte, se considera margen de un mes de inactividad de planta al año, por procesos de mantención y fallas inesperadas. De este modo, el número de máximos ciclos es,

$$N_{Mcb} = \frac{8040 [horas disponibles por año]}{110,3 [horas por ciclo]} = 74 [ciclos]$$

Ecuación 3: Número máximo de ciclos por planta en un año.

Es por esto que, para cumplir con la totalidad del caso base, se necesitarían 3 plantas productoras trabajando en paralelo.

Según el balance de masa la producción por ciclo de etanol y butanol es de 48 y 70,5 toneladas respectivamente por ciclo batch, entonces la producción anual es:

$$P_{Et} = 29,5[ton] \cdot 218[ciclos] = 6431[ton]$$

Ecuación 4: Producción anual de etanol.

$$P_{but} = 70,5 [ton] \cdot 218 [cilcos] = 15269[ton]$$

Ecuación 5: Producción anual de butanol.

Considerando las densidades de butanol [24] y etanol [26],

$$PV_{et} = \frac{6431[ton]}{0,789 \left[\frac{ton}{m^3} \right]} = 8150,82[m^3]$$

Ecuación 6: Producción volumétrica anual de etanol.

$$PV_{but} = \frac{15269[ton]}{0,81 \left[\frac{ton}{m^3} \right]} = 18850,62[m^3]$$

Ecuación 7: Producción volumétrica anual de butanol.

La totalidad de mezcla anual a generar, Considerando que el etanol se mezcla al 5% con gasolina y el butanol a 16%, la totalidad de mezcla anual a generar,

$$PV_{m,et} = 8150,82[m^3] \cdot \frac{100}{RE} = 163016,48,2[m^3]$$

Ecuación 8: Producción anual de mezcla gasolina-etanol.

$$PV_{m,but} = 18850,62[m^3] \cdot \frac{100}{RB} = 117816,38 [m^3]$$

Ecuación 9: Producción anual de mezcla gasolina-butanol.

Considerando el consumo semanal gasolina se estima el aporte de mezclas combustible-alcohol anuales a la matriz energética.

$$AP_{m,et} = PV_{m,et} \cdot \frac{100}{CG \cdot 52 [sem]} = 1,27 \%$$

Ecuación 10: Aporte mezcla etanol-gasolina.

$$AP_{m,but} = PV_{m,but} \cdot \frac{100}{CG \cdot 52 [sem]} = 0,92 \%$$

Ecuación 11: Aporte mezcla butanol-gasolina.

Es decir, se reemplaza el 1,27% de bencina consumida en Chile por mezcla etanol-gasolina y el 0,92 % por mezcla butanol-gasolina, logrando un reemplazo total del 2,2%. Cabe de destacar que el aporte del etanol es mayor debido a que su reemplazo es alrededor de tres veces menor que el de butanol.

8.3 Límite de Batería

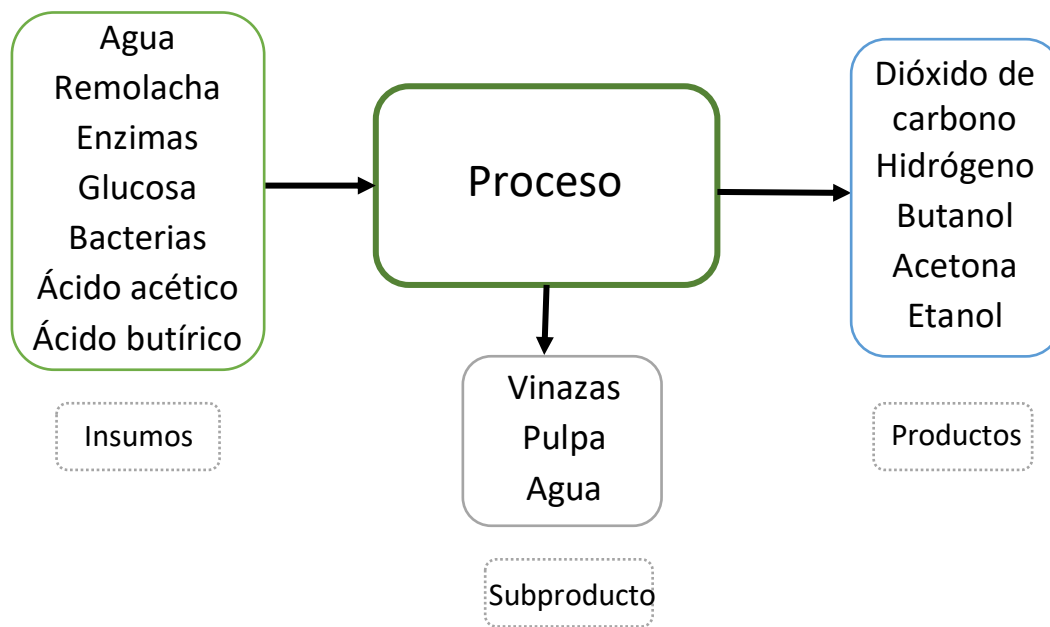


Ilustración 3: Límite de Batería

8.4 Diagrama de Bloques

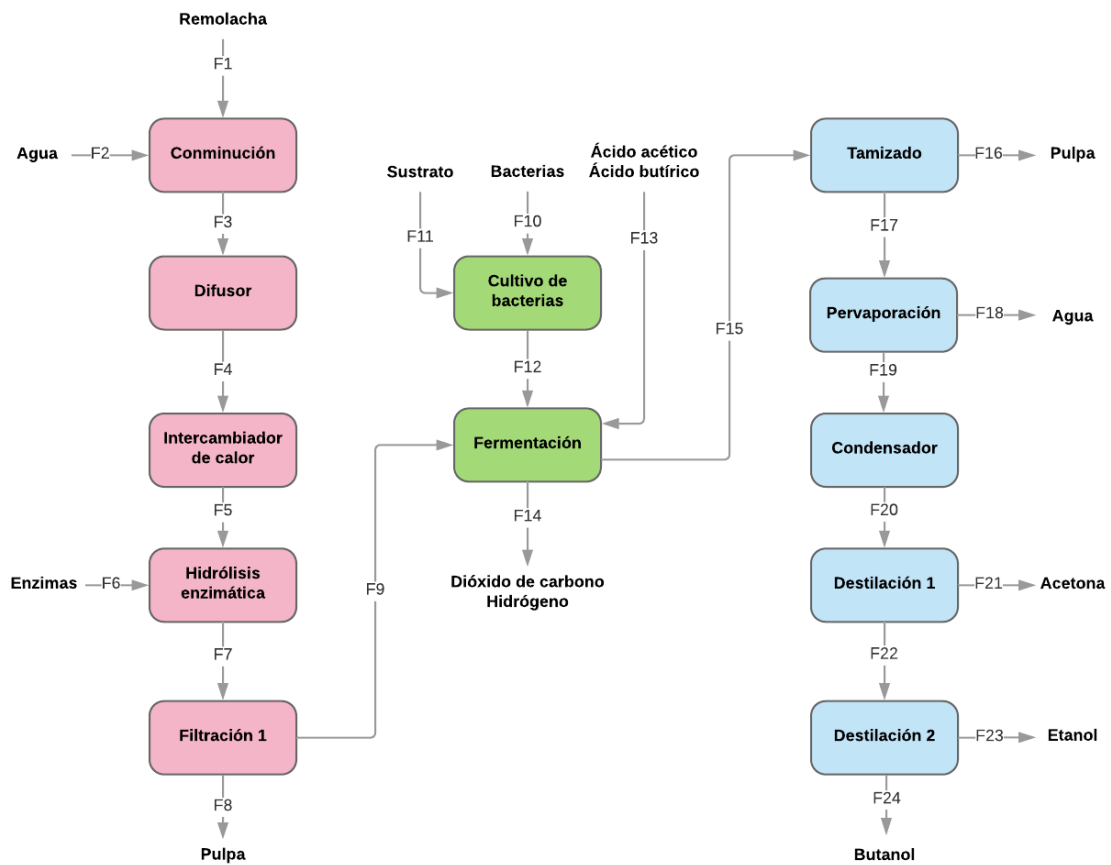


Ilustración 4: Diagrama actual de la producción de bioetanol, biobutanol y acetona mediante Fermentación ABE, junto con sus respectivos flujos.

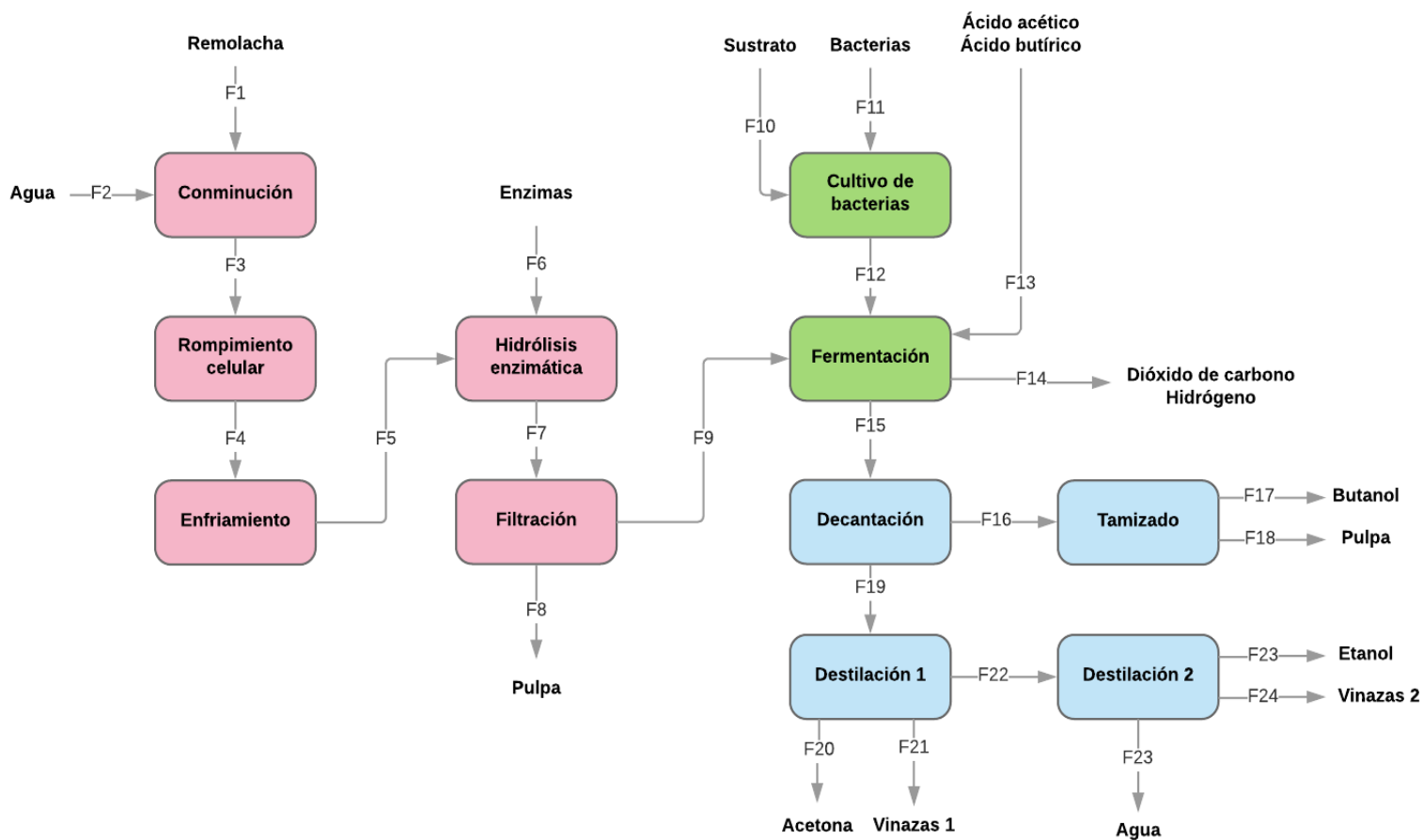


Ilustración 5: Diagrama de bloques del proceso de la entrega anterior.

8.5 Balance de Masas

8.5.1 Balance en el equipo de Conminución

La etapa de conminución es una operación mecánica, en la cual no existe pérdida de masa. Por lo tanto, el balance de masa queda expresado según la Ecuación 12.

$$F_1 + F_2 = F_3$$

Ecuación 12: Balance de masa en equipo de conminución.

El detalle de las composiciones de los flujos de entrada y salida se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4: Balance de masa por especie en conminución.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F1	Remolacha sólida	2998,7
F2	Agua	749,7
F3	Agua	2998,7
	Sacarosa	479,8
	Pulpa	269,9
	Total	3748,4

8.5.2 Balance en el difusor

Se aumenta la temperatura de la mezcla con el fin de favorecer la difusión de la sacarosa de las células vegetales de remolacha a la solución. En esta operación se alcanza una temperatura de 100 [°C], bajo el supuesto de no sufrir transformación en la composición de la suspensión. A continuación, se presenta el balance de masa por especie.

Tabla 5: Balance de masa por especie en difusor.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]	Temperatura [°C]
F3	Agua	2998,7	25
	Sacarosa	479,8	25
	Pulpa	269,9	25
	Total	3748,4	25
F4	Agua	2998,7	100
	Sacarosa	479,8	100
	Pulpa	269,8	100
	Total	3748,4	100

Donde F3 es el flujo de entrada, mientras que F4 el de salida.

$$F3 = F4$$

Ecuación 13: Balance de masa en difusión.

8.5.3 Balance en el Intercambiador de Calor

Se disminuye la temperatura de la suspensión desde 100 hasta 25°C, temperatura necesaria en el proceso de hidrólisis enzimática. A continuación, se presenta el balance de masa por especie, bajo el supuesto de que la suspensión no sufre transformación en su composición.

Tabla 6: Balance de masa en I.C.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]	Temperatura [°C]
F4	Agua	2998,7	120
	Sacarosa	479,8	120
	Pulpa	269,8	120
	Total	3748,4	120
F5	Agua	2998,7	25
	Sacarosa	479,8	25
	Pulpa	269,8	25
	Total	3748,46	25

Donde F4 es el flujo de entrada, mientras que F5 el de salida.

$$F4 = F5$$

Ecuación 14: Balance de masa en I.C.

8.5.4 Balance en el Reactor de Hidrólisis Enzimática

Se presenta el balance de masa en el reactor de hidrólisis en la Tabla 7. Las composiciones de salida se determinaron a partir de la simulación que se detalla en el Anexo 8.9.

Tabla 7: Masa de entrada y salida del reactor de hidrólisis enzimática.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F5	Agua	2998,7
	Sacarosa	479,8
	Pulpa	269,8
	Total	3748,4
F6	Enzimas	0,36
F7	Agua	2973,7
	Sacarosa	4,79
	Glucosa y fructosa	500
	Enzimas	0,36
	Pulpa	269,8
	Total	3748,7

Donde,

$$F5 + F6 = F7$$

Ecuación 15: Balance de masa de la hidrólisis enzimática.

8.5.5 Balance en el Filtro

Se expresa el balance de masa en el filtro en la Tabla 8, donde F7 corresponde a la masa total que entra al filtro, F8 a la masa de torta generada y F9 a la masa total de suspensión filtrada.

Tabla 8: Balance de masa en filtro.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F7	Agua	2973,7
	Glucosa	500
	Sacarosa	4,79
	Enzimas	0,36
	Pulpa	269,8
	Total	3748,7
F8	Pulpa	269,6
	Enzimas	0,36
	Total	269,98
F9	Agua	2973,7
	Glucosa	500
	Sacarosa	4,79
	Pulpa	0,3
	Total	3478,8

Donde,

$$F7 = F8 + F9$$

Ecuación 16: Balance de masa en filtrado.

8.5.6 Balance en el Reactor de Cultivo de Bacterias

El balance de masa correspondiente al reactor de crecimiento bacteriano se divide en dos ecuaciones principales; balance de glucosa, o nutriente limitante, y balance de células.

La variación de masa de glucosa en el tiempo es la diferencia entre la entrada, la salida y los sustratos consumidos en el crecimiento de las bacterias.

$$F \cdot S_{g0} - F \cdot S_{gs} - \frac{\mu_{\max} \cdot X \cdot V}{Y_{\frac{x}{s}}} = \frac{d(S_g \cdot V)}{dt}$$

Ecuación 17: Balance de masa de glucosa

La reacción ocurre en un reactor Batch, por lo tanto, el balance queda:

$$\frac{-\mu_{\max} \cdot X}{Y_{x/s}} = \frac{dS_g}{dt}$$

Ecuación 18: Balance de masa de glucosa en el reactor Batch

Por otra parte, la variación de masa de bacterias es la diferencia entre el crecimiento y la muerte de células:

$$F \cdot X_0 - F \cdot X_s + \mu_{\max} \cdot X \cdot V - k_d \cdot X \cdot V = \frac{d(X \cdot V)}{dt}$$

Ecuación 19: Balance de masa de Bacterias

Análogo al balance de glucosa, la reacción ocurre en un reactor batch.

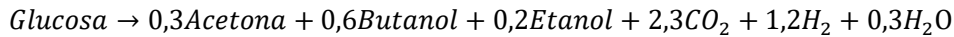
$$(\mu_{\max} - k_d) \cdot X = \frac{dX}{dt}$$

Ecuación 20: Balance de masa de bacterias en reactor Batch

Para encontrar las concentraciones de salida del reactor de bacterias, se realizó una modelación en el Anexo 8.11.

8.5.7 Balance en el Fermentador

La cantidad de emisiones de CO₂ e H₂ de este reactor se determina mediante la Ecuación 21 [20].



Ecuación 21: Relación estequiométrica en fermentación ABE a partir de glucosa.

A partir de la masa de entrada de glucosa al reactor de fermentación ABE se puede determinar las emisiones de CO₂ y H₂, según las relaciones estequiométricas dadas en la Ecuación 22.

$$n_{CO_2} = 2,3 \left(\frac{m_{glucosa}}{PM_{glucosa}} \right)$$

Ecuación 22: Cálculo de moles de CO₂.

Sustituyendo los valores de masa y peso molecular de glucosa en la Ecuación 23, se obtiene el número de moles:

$$n_{CO_2} = 2,3 \left(\frac{5 \cdot 10^8 [g]}{180,156 [g/mol]} \right) = 6383,36 [kmol]$$

Ecuación 23: Cálculo de moles de CO₂.

Ahora se determina la cantidad de masa del gas CO₂ saliente del fermentador ABE.

$$m_{CO_2} = n_{CO_2} \cdot PM_{CO_2} = 6383,36 [kmol] \cdot 44,01 \left[\frac{g}{mol} \right] = 280,93 [ton]$$

Ecuación 24: Cálculo de masa de CO₂.

Luego, para el hidrógeno se tiene:

$$n_{H_2} = 1,2 \left(\frac{m_{glucosa}}{PM_{glucosa}} \right)$$

$$n_{H_2} = 1,2 \left(\frac{5 \cdot 10^8 [g]}{180,156 [g/mol]} \right) = 3330,44 [kmol]$$

Ecuación 25: Cálculo de moles de H₂.

Por último, se calcula la masa de gas hidrógeno generada por batch de fermentación ABE.

$$m_{H_2} = n_{H_2} \cdot PM_{H_2} = 6,66 [ton]$$

Ecuación 26: Cálculo de masa de H₂.

A partir de lo anterior, el balance de masa en este equipo es como se muestra en la Tabla 9.

Tabla 9: Balance de masa en fermentador.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F9	Agua	2973,7
	Sacarosa	4,80
	Pulpa	0,27
	Glucosa	500
	Total	3478,8
F12	Bacterias	0,05
	Acetona	0
	Butanol	0
	Etanol	0
	Total	0,05
F13	Ácido Butírico	0,05
	Ácido Acético	0,05
	Total	0,1
F14	Dióxido de Carbono	280,93
	Hidrógeno	6,66
	Total	287,59
F15	Acetona	48,00
	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Pulpa	0,27
	Restos bacterias	25,3
	Agua	2973,74
	Sacarosa	4,80
	Total	3152,1

8.5.8 Balance en el Tamiz Rotatorio

Asumiendo que este equipo separa de manera perfecta la pulpa remanente y los restos de bacterias provenientes del fermentador, y que además la cantidad de líquido retenido por estos componentes sólidos es despreciable, el balance queda según se muestra en la Tabla 10.

Tabla 10: Balance en el tamiz rotatorio.

Flujo	Nombre	Cantidad [Ton]
F15	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	2973,74
	Restos de bacterias	25,3
	Pulpa	0,27
	Sacarosa	4,80
	Total	3152,06
F16	Pulpa	0,27
	Restos de bacterias	25,3
	Total	25,52
F17	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	2973,74
	Sacarosa	4,80
	Total	3126,54

Correspondiendo a:

$$F15 = F16 + F17$$

Ecuación 27: Balance en el tamiz rotatorio.

8.5.9 Balance en el pervaporador

En el pervaporador ocurre la separación de los compuestos orgánicos (acetona, butanol y etanol) del agua. En esta operación unitaria se hace uso de una membrana hidrofóbica que restringe la difusión de agua mientras que se facilita el traspaso de los compuestos orgánicos. Según el dimensionamiento presente en Anexo 8.16, el fluido pervaporado contiene la totalidad de acetona, butanol y un bajo contenido de agua. El balance de masa se muestra en la Tabla 11.

Tabla 11: Balance de masa en el pervaporador.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F17	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	2973,77
	Sacarosa	4,80
	Total	3126,57
F18	Agua	2973,66
	Sacarosa	4,80
	Total	2978,46
F19	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	0,104
	Total	148,10

Donde,

$$F17 = F18 + F19$$

Ecuación 28: Balance de masa en pervaporador.

8.5.10 Balance en el condensador

Ya que en el condensador lo que sale corresponde a lo que entra, el balance se da según la Tabla

12.

Tabla 12: Balance de masa en el condensador.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F19	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	0,104
	Total	148,10
F20	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	0,104
	Total	148,10

8.5.11 Balance en las Torres de destilación

A modo de contextualización, las torres de destilación constan de las secciones mostradas en la Ilustración 6.

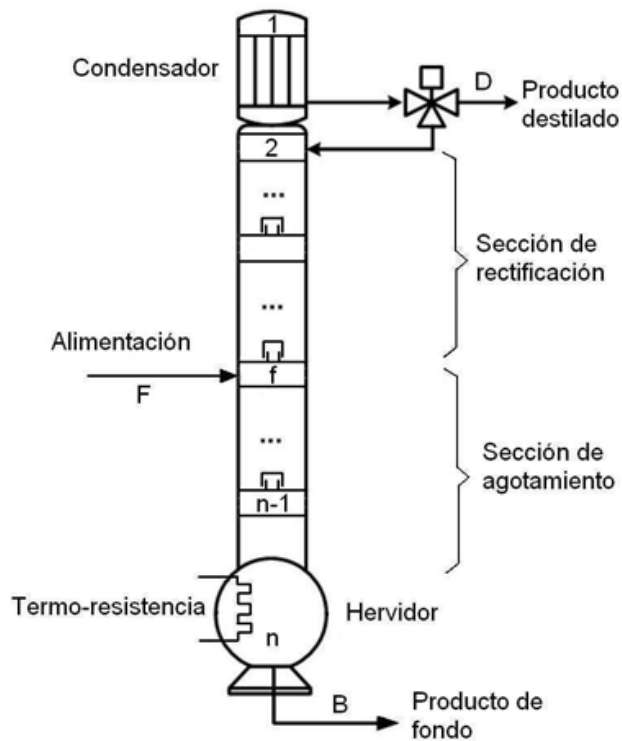


Ilustración 6: Esquema de una torre de destilación.

Torre 1

Se estudia como una separación Acetona etanol y se considera condensador total.

Las ecuaciones para obtener los flujos de salidas son:

$$F_{20} = F_{21} + F_{22}$$

Ecuación 29: Balance de flujos torre 1

$$F_{20} \cdot x_{F1} = F_{21} \cdot x_{D1} + F_{22} \cdot x_{B1}$$

Ecuación 30: Balance de masa para la acetona

Las condiciones de entrada y salida del sistema están dadas en Tabla 13

Tabla 13: Condiciones en torre de destilación 1.

Símbolo	Definición	Valor	Unidad
F_{20}	Flujo de entrada de mezcla	185,75	$[m^3/h]$
F_{21}	Flujo de salida de la cabeza	60,91	$[m^3/h]$
F_{22}	Flujo de salida de la cola	124,91	$[m^3/h]$
x_{F1}	Fracción volumétrica de acetona en la entrada	0,33	-
x_{D1}	Fracción volumétrica de acetona en la cabeza	0,994	-
x_{B1}	Fracción volumétrica de acetona en la cola	0,006	-
x_{WD1}	Fracción volumétrica de agua en la cabeza	1,38E-03	-
x_{WB1}	Fracción volumétrica de agua en la cola	1,48E-04	-
x_{ED1}	Fracción volumétrica de etanol en la cabeza	4,13E-03	-
x_{EB1}	Fracción volumétrica de etanol en la cola	0,299	-
x_{BD1}	Fracción volumétrica de butanol en la cabeza	4,95E-04	
x_{BB1}	Fracción volumétrica de butanol en la cola	0,701	
L_{iq1}	Flujo de líquido que es devuelto a la torre en el condensador	525,70	$[m^3/h]$
L'_{iq1}	Flujo de líquido que es ingresado al primer plato ($F_{19} + L_{iq}$)	711,46	$[m^3/h]$
V_{ap1}	Flujo de vapor que sale del último plato antes del condensador	586,62	$[m^3/h]$
V'_{ap1}	Flujo de vapor que sale del plato de alimentación	586,62	$[m^3/h]$

Las fracciones volumétricas del evaporador se calcularon proporcional a las presiones de vapor de los elementos que conforman la mezcla destilada, según la siguiente tabla:

Tabla 14: Presión de vapor de componentes

Componente	Presión de vapor a 40°C
Acetona	400 [mmHg][27]
Etanol	150 [mmHg][28]
Agua	50 [mmHg][28]
Butanol	18 [mmHg][12]

Para encontrar la fracción volumétrica de cada Etanol y Agua en la cola de la destilación, se obtiene bajo la siguiente relación:

$$\frac{\text{Volumen de entrada a la torre} - \text{volumen retirado en la cabeza}}{\text{Flujo total de la cola} - \text{volumen de producto de interés}}$$

Torre 2

Se estudia como una separación Etanol-Butanol y se considera condensador total.

Las ecuaciones para obtener los flujos de salidas son:

$$F_{22} = F_{23} + F_{24}$$

Ecuación 31: Balance de flujos torre 2

$$F_{22} \cdot x_{F2} = F_{23} \cdot x_{D2} + F_{24} \cdot x_{B2}$$

Ecuación 32: Balance de masa de etanol

Las condiciones de entrada y salida del sistema están dadas en la Tabla 15:

Tabla 15: Condiciones en torre de destilación 2.

Símbolo	Definición	Valor	Unidad
F_{22}	Flujo de entrada de mezcla	124,91	$[m^3/h]$
F_{23}	Flujo de salida de la cabeza	37,15	$[m^3/h]$
F_{24}	Flujo de salida de la cola	88,03	$[m^3/h]$
x_{F2}	Fracción volumétrica de etanol en la entrada	0,30	-
x_{D2}	Fracción volumétrica de etanol en la cabeza	0,994	-
x_{B2}	Fracción volumétrica de etanol en la cola	0,006	-
x_{WD2}	Fracción volumétrica de agua en la cabeza	3,40E-04	-
x_{WB2}	Fracción volumétrica de agua en la cola	6,54E-05	-
x_{ED2}	Fracción volumétrica de acetona en la cabeza	4,83E-03	-
x_{EB2}	Fracción volumétrica de acetona en la cola	0,007	-
x_{BD2}	Fracción volumétrica de butanol en la cabeza	8,31E-04	
x_{BB2}	Fracción volumétrica de butanol en la cola	0,997	
L_{iq2}	Flujo de líquido que es devuelto a la torre en el condensador	137,87	$[m^3/h]$
L'_{iq2}	Flujo de líquido que es ingresado al primer plato ($F_{19} + L_{iq}$)	262,71	$[m^3/h]$
V_{ap2}	Flujo de vapor que sale del último plato antes del condensador	175,02	$[m^3/h]$
V'_{ap2}	Flujo de vapor que sale del plato de alimentación	175,02	$[m^3/h]$

8.6 Dimensionamiento rodillos de molienda (HPGR)

El HPGR es un molino que consta de dos rodillos que giran en direcciones opuestas, donde la presión es aplicada sobre uno de ellos mediante un sistema hidro-neumático, mientras que el otro rodillo se mantiene fijo dentro del marco de soporte. [29]

La Ilustración 7, muestra un esquema general del molino HPGR, el cual sirve para identificar las variables más importantes en el dimensionamiento del diámetro(D) del rodillo.

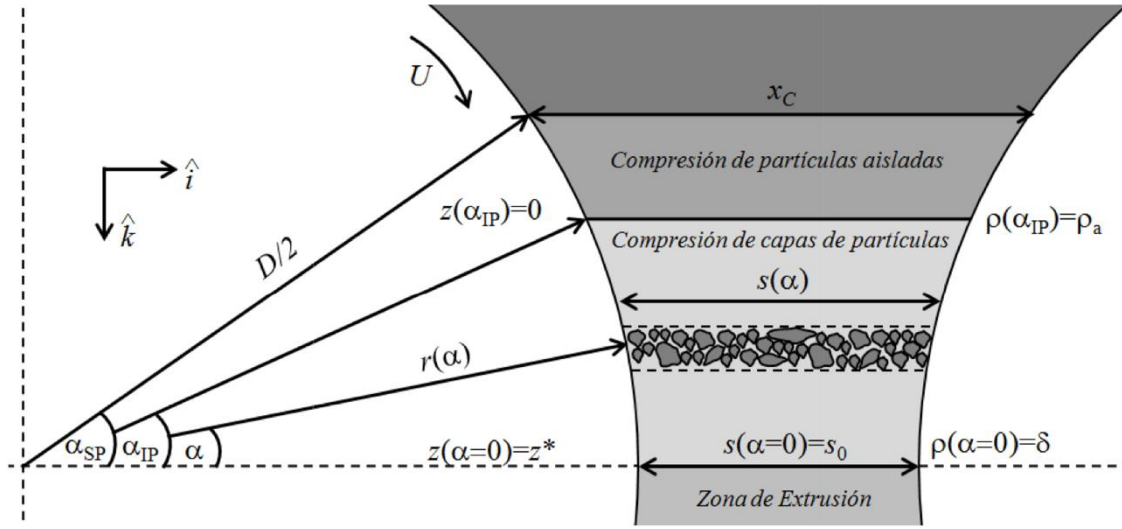


Ilustración 7: Zonas de conminución en un equipo HPGR y las variables a considerar en el dimensionamiento del diámetro (D) del rodillo. [29]

A continuación, en la Ecuación 33, se presenta el vector de posición del centro de masa de la remolacha (Beta Vulgaris) mientras está en proceso de molienda, derivando esta expresión se obtiene la velocidad angular de los rodillos mostrada en la Ecuación 34.

$$r(\alpha) = \frac{1}{2}(D + s_0)\hat{i} + \frac{D}{2}\sin\alpha\hat{k}$$

Ecuación 33: Vector de posición $r(\alpha)$ del centro de masas de una franja de material de ancho $s(\alpha)$ [29].

$$v(\alpha) = \frac{D}{2} * \frac{2U}{D} * \cos\alpha\hat{k} = U * \cos\alpha\hat{k}$$

Ecuación 34: Velocidad angular de los rodillos. [29]

Por otro lado, el ancho de la franja operacional se relaciona con el diámetro (D) y el gap de los rodillos (S_0), según la Ecuación 35. Además, el flujo de remolacha a tratar por el molino se puede determinar a través de la Ecuación 36.

$$s(\alpha) = s_0 + D(1 - \cos\alpha)$$

Ecuación 35: Ancho de franja operacional.[29]:

$$G_R = 3600 \cdot \rho(\alpha) \cdot s(\alpha) \cdot L \cdot U \cdot \cos(\alpha)$$

Ecuación 36: Flujo de remolacha en etapa de conminución.[29]

La capacidad de tratamiento de remolacha (G_R), se calcula en base a las toneladas que se requieren tratar en etapas posteriores, donde el requerimiento está dado según el reactor de fermentación ABE, es decir, $G^* = 3158[ton/batch]$. Se asume que la conminución estará en operación por 12 [horas], por lo tanto, el flujo de Beta Vulgaris a tratar en molienda se determina a continuación:

$$G_R = \frac{G^*}{t_{molienda}} = \frac{3748 [ton]}{12[h]} = 312,33 \left[\frac{ton}{h}\right]$$

En particular, el valor de G_R en la zona de extrusión ($\alpha = 0$) es independiente del ángulo, puesto que se ha impuesto la condición de estado estacionario en la resolución del problema. [29] Por lo tanto, de la Ecuación 35, se obtiene:

$$s(\alpha = 0) = s_0 = 8 [mm] \quad [17]$$

Por otro lado, la densidad de la remolacha en la zona de extrusión $\rho(\alpha = 0)$, se determina en base al volumen de agua contenido en la Beta Vulgaris, ya que es un líquido incompresible [30]. Además, la cantidad de agua presente en la remolacha azucarera corresponde al 75% en peso [31].

$$\rho(\alpha = 0) = \frac{m_{Remolacha}}{m_{agua}/\rho_{agua}} = \frac{m_{Remolacha}}{(0.75 * m_{remolacha})/\rho_{agua}} = \frac{1}{\left(\frac{0.75}{1 \left[\frac{ton}{m^3}\right]}\right)} = 1.33 \left[\frac{ton}{m^3}\right]$$

Para el largo de los rodillos, se utilizará valores típicos usados para molinos HPGR con alta capacidad de tratamiento, es decir, $L = 1.8 [m]$. [29] Por último, la velocidad de los rodillos se determina en base a la Ecuación 37 :

$$U = 1.35\sqrt{D}$$

Ecuación 37: Velocidad angular de los rodillos en función del diámetro.

Finalmente, reemplazando la Ecuación 37, junto con los valores obtenidos de cada variable en la Ecuación 36 se obtiene:

$$G_R = 3600 * 1.33 \left[\frac{ton}{m^3}\right] * 8 * 10^{-3}[m] * 1.8 [m] * 1.35\sqrt{D} * \cos(0)$$

Despejando el diámetro de los rodillos, se obtiene:

$$D = \left(\frac{312,33 \left[\frac{ton}{h}\right]}{3600 * 1.33 \left[\frac{ton}{m^3}\right] * 8 * 10^{-3}[m] * 1.8 [m] * 1.35} \right)^2 \approx 11,2 [m]$$

8.7 Dimensionamiento del difusor

A continuación, se presenta el dimensionamiento del difusor, equipo que facilita la difusión de sacarosa en el agua. Esta operación unitaria consiste en un intercambiador de calor de placas y en un estanque calefaccionado. De esta manera, la suspensión de pulpa se calienta de 25 a 80[°C] en un intercambiador de placas, mediante un flujo de agua caliente a 100[°C] y luego entra de manera continua a un estanque calefaccionado donde se mantiene a esta temperatura durante 1 hora según lo indicado [32]. Este proceso es continuo, teniendo un flujo idéntico al de la operación anterior, la conminución.

Considerando la transferencia de calor en el agua de calentamiento,

$$Q_{agua} = -m'_a c_{p,a} \Delta T_{agua}$$

Ecuación 38: Transferencia de calor del agua.

Y la transferencia de calor en la suspensión pulpa.

$$Q_{sp} = m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp}$$

Ecuación 39: Transferencia de calor de la pulpa.

Suponiendo que no hay pérdidas de calor.

$$m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp} = -m'_a c_{p,a} \Delta T_{agua}$$

Ecuación 40

Donde:

$$\Delta T_{sp} = T_{sp,out} - T_{sp,in}$$

Ecuación 41: Diferencia de temperatura de la pulpa.

$$\Delta T_{agua} = T_{a,out} - T_{a,in}$$

Ecuación 42: Diferencia de temperatura del agua.

Sin embargo, se desconoce la temperatura de salida del agua de calentamiento. Resolviendo la ecuación 8.

$$T_{a,out} = \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}}$$

Ecuación 43

Por otro lado, considerando la ecuación de transferencia de calor en la superficie del intercambiador.

$$Q_{sp} = AU_c \Delta T_{ml}$$

Ecuación 44: Transferencia de calor en función del área de transferencia.

Donde:

$$T_{ml} = \frac{(T_{sp,in} - T_{a,out}) - (T_{sp,out} - T_{a,in})}{\ln \left[\frac{(T_{sp,in} - T_{a,out})}{(T_{sp,out} - T_{a,in})} \right]}$$

Ecuación 45: Diferencia media logarítmica.

Reemplazando:

$$T_{ml} = \frac{\left(T_{sp,in} - \frac{T_{a,in}m'_a c_{p,a} - m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}}\right) - (T_{sp,out} - T_{a,in})}{\ln \left[\frac{\left(T_{p,in} - \frac{T_{a,in}m'_a c_{p,a} - m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}}\right)}{(T_{sp,out} - T_{a,in})} \right]}$$

Ecuación 46

Se define el coeficiente global de transferencia de calor:

$$U_c = \left(\frac{1}{h_a} + \frac{1}{h_{sp}} + \frac{\Delta x}{k_{ac}} \right)^{-1}$$

Ecuación 47: Coeficiente global de transferencia de calor.

Siendo h_a estimable según correlaciones [33]. El valor de h_{sp} se obtiene de bibliografía [34] debido a que la falta de datos térmicos y cinéticos impiden su estimación mediante correlaciones.

$$h_a = \frac{Nu_{a,x} k_a}{x}$$

Ecuación 48: Coeficiente local convectivo del agua.

Donde:

$$Nu_{a,x} = 0,332 Pr_a^{\frac{1}{3}} \sqrt{Re_{a,x}}$$

Ecuación 49: Correlación adimensional de Nusselt.

El número de Prandtl del agua en estas condiciones es proporcionado por tablas [35], mientras que el número de Reynolds del agua se define:

$$Re_{a,x} = \frac{\rho_a v_a x}{\mu}$$

Ecuación 50: Número de Reynolds.

De esta forma:

$$h_a = \frac{0,332 Pr_a^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{\rho_a v_a x}{\mu}} k_a}{x}$$

Ecuación 51

Reemplazando en el coeficiente global de transferencia de calor:

$$U_c = \left(\frac{1}{\frac{0,332 Pr_a^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{\rho_a v_a x}{\mu}} k_a}{x}} + \frac{1}{h_{sp}} + \frac{\Delta x}{k_{ac}} \right)^{-1}$$

Ecuación 52

Reemplazando las ecuaciones anteriores en la Ecuación 44:

$$Q = \frac{A \left[\frac{\left(T_{sp,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_{sp} c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right) - (T_{sp,out} - T_{a,in})}{\ln \left[\frac{\left(T_{p,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_p c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right)}{(T_{sp,out} - T_{a,in})} \right]} \right]}{\left(\frac{1}{0,332 Pr^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{\rho_a v_a x}{\mu}} k_a} + \frac{1}{h_{sp}} + \frac{\Delta x}{k_{ac}} \right)}$$

Ecuación 53

Despejando el área de transferencia, e igualando la transferencia de calor con se obtiene la ecuación de diseño del área intercambiador de calor.

$$A = \frac{\left(\frac{1}{0,332 Pr^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{\rho_a v_a x}{\mu}} k_a} + \frac{1}{h_{sp}} + \frac{\Delta x}{k_{ac}} \right)}{-m'_p c_{p,sp} \Delta T_{pulpa} \left[\frac{\left(T_{sp,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_p c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right) - (T_{sp,out} - T_{a,in})}{\ln \left[\frac{\left(T_{p,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_p c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right)}{(T_{sp,out} - T_{a,in})} \right]} \right]}$$

Ecuación 54: Área de superficie del intercambiador de calor.

Por otra parte, el estanque calefaccionado se diseña según el tiempo de residencia.

$$V_{estanque} = t \cdot V'$$

Ecuación 55: Volumen de estanque.

Donde t corresponde al tiempo de residencia y V' el flujo volumétrico de la suspensión de pulpa.

Se expresa el balance de masa en la siguiente tabla:

Tabla 16: Balance de masa difusor.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]	Temperatura [°C]
F3	Agua	2998,77	25
	Sacarosa	479,803	25
	Pulpa	269,889	25
	Total	3748,46	25

F4	Agua	2998,77	80
	Sacarosa	479,803	80
	Pulpa	269,889	80
	Total	3748,46	80

El flujo F3 proviene del equipo de conminución a una temperatura de 25 [°C]. Como líquido de calefacción en el intercambiador de calor se utiliza agua a 100[°C], sus propiedades se especifican en Tabla 21. El flujo F4 corresponde a la suspensión de pulpa, sus propiedades se especifican en Tabla 22. La Tabla 19 expone las propiedades físicas y termodinámicas del intercambiador de calor.

Tabla 17: Propiedades agua de calefacción.

	Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
Agua						
	Pr	1,75		Número de Prandtl para agua a 100°C	Tabla de datos.	[35]
	ρ_a	957,9	$[kg/m^3]$	Densidad del agua a 100°C.	Tabla de datos.	[35]
	μ	0,00028	$[Pa \cdot s]$	Viscosidad dinámica del agua a 100°C.	Tabla de datos.	[35]
	k_a	0,679	$[W/m^\circ C]$	Conductividad térmica del agua 100°C	Tabla de datos.	[35]
	$T_{a,in}$	100	$[^\circ C]$	Temperatura del agua a la entrada del I.C.	Se requiere que la suspensión llegue a temperatura ambiente.	
	$c_{p,a}$	4217	$[J/kg^\circ C]$	Calor específico del agua a 100°C	Tabla de datos.	[35]
	v'_a	0,0852	$[m^3/s]$	Flujo de agua refrigerante.	Igual al flujo de suspensión.	
	v_a	22,715	$[m/s]$	Velocidad del agua a la entrada del I.C.	Se estima según flujo de agua y área transversal entre placas del I.C.	
	m'_a	81,595	$[kg/s]$	Flujo másico de agua	Según densidad del agua.	

Tabla 18: Propiedades suspensión de pulpa.

	Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
F3						
	h_{sp}	5542,61	$[W/m^2^\circ C]$	Coeficiente de convección local para la suspensión.	Debido a la falta de datos termodinámicos y cinéticos, se estima mediante bibliografía.	[34]
	$T_{sp,in}$	25	$[^\circ C]$	Temperatura suspensión a la entrada del I.C.	Proveniente del rompimiento celular en autoclave.	
	$T_{sp,out}$	80	$[^\circ C]$	Temperatura de salida de la suspensión de pulpa.	Temperatura necesaria para entrar a proceso de hidrólisis.	
	ρ_{sp}	1018,64	$[kg/m^3]$	Densidad de suspensión de pulpa	Se ponderan las densidades de los componentes de la corriente*.	
	v'_{sp}	0,0852	$[m^3/s]$	Flujo volumétrico de suspensión.	Se mantiene el flujo de salida de la conminución.	
	m'_{sp}	86,769	$[kg/s]$	Flujo másico de suspensión.	Según densidad de la suspensión.	

$c_{p,sp}$	2100	$[J/kg^{\circ}C]$	Calor específico promedio de la suspensión de pulpa.	Debido a la falta de datos, se considera un valor promedio de bibliografía.	[36]
ΔT_{sp}	55	$[^{\circ}C]$	Diferencia de temperatura en la suspensión de pulpa.		

$$*\rho_{sp} = \frac{F4_{agua} \rho_a + F4_{sacarosa} \rho_{sac} + F4_{pulpa} \rho_p}{F4}$$

Tabla 19: Propiedades I.C. de placas.

	Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
I.C.						
	L_p	2,246	$[m]$	Largo de placa.	Se estima según I.C. placa industrial del mercado.	[37]
	l_p	0,75	$[m]$	Largo transversal del placa.	Se estima según I.C. placa industrial del mercado.	[37]
	A_p	1,6845	$[m^2]$	Área de transferencia por placa.	Se estima según ancho y largo de placa.	
	Δx	0,0006	$[m]$	Espesor de placa.	Se estima según I.C. placa industrial del mercado.	[37]
	x	0,005	$[m]$	Distancia entre placas.	Se estima según I.C. placa industrial del mercado.	[38]
	A_t	0,00375	$[m^2]$	Área transversal entre placas	Se calcula según ancho de placa y distancia entre placas	
	k_{ac}	15,6	$[W/m^{\circ}C]$	Conductividad térmica de la placa.	Se considera que las placas de I.C son acero inoxidable.	[35]
	n_{pmax}	107		Número de máximo placas por I.C.	Se estima según I.C. placa industrial del mercado.	[37]

Según las tres tablas anteriores, es posible determinar el área de transferencia necesaria para calentar la suspensión de pulpa desde 25 a 80 $[^{\circ}C]$ según Ecuación 60.

$$A = 179,706 [m^2]$$

Ecuación 56: Área total necesaria I.C.

Según el área de una placa (Tabla 19; **Error! No se encuentra el origen de la referencia.**) se determina el número de placas necesarias.

$$N_p = \frac{A}{A_p} \cong 107$$

Ecuación 57: Número de placas necesarias.

Según el número máximo de placas por intercambiador, se determina el número de intercambiadores en paralelo que se necesitan.

$$N_{IC} = \frac{N_p}{n_{pmax}} = 1$$

Ecuación 58: Número de I.C.

Se determina el volumen del estanque calefaccionado según la Ecuación 55, un tiempo de residencia igual a 1 hora y el flujo volumétrico de suspensión proveniente del intercambiador. Se considera que no existe acumulación.

$$V_{\text{estanque}} = 306,65 \text{ [m}^3\text{]}$$

Ecuación 59: Volumen de estanque.

De este modo, se necesita un intercambiador de calor de 107 placas y un estanque calefaccionado a 80[°C] con volumen igual 306,65 [m³]. Según el flujo de salida del equipo, el tiempo de operación es de 12 horas por ciclo batch.

8.8 Dimensionamiento del intercambiador de calor

Se escoge dimensionar un intercambiador de calor (I.C.) de placas debido a que el esparcimiento de la suspensión de pulpa a lo largo y ancho de cada placa permite una mayor área de transferencia y un volumen reducido entre dos placas, de este modo se logra aumentar el área específica y aumentar la transferencia de calor. Esto es esencial debido a que se desea disminuir en 55 [°C] la temperatura de la pulpa. Considerando el dimensionamiento del equipo anterior (difusor), se tiene la ecuación general para un intercambiador de calor.

$$A = \frac{\left(\frac{1}{0,332 Pr^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{\rho_a v_a x}{\mu}} k_a} + \frac{1}{h_{sp}} + \frac{\Delta x}{k_{ac}} \right)}{-m'_p c_{p,sp} \Delta T_{pulp}} \left[\frac{\left(T_{sp,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_p c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right) - (T_{sp,out} - T_{a,in})}{\ln \left[\frac{\left(T_{p,in} - \frac{T_{a,in} m'_a c_{p,a} - m'_p c_{p,sp} \Delta T_{sp}}{m'_a c_{p,a}} \right)}{(T_{sp,out} - T_{a,in})} \right]} \right]$$

Ecuación 60: Área de superficie del intercambiador de calor.

Se expresa el balance de masa en la siguiente tabla:

Tabla 20: Balance de masa I.C.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]	Temperatura [°C]
F4	Agua	2998,77	80
	Sacarosa	479,803	80
	Pulpa	269,889	80
	Total	3748,46	80
F5	Agua	2998,77	25
	Sacarosa	479,803	25
	Pulpa	269,889	25

	Total	3748,46	25
--	-------	---------	----

El flujo F4 proviene del equipo difusor donde alcanza una temperatura de 80 [°C]. Como líquido refrigerante en el intercambiador de calor se utiliza agua a 5[°C], sus propiedades se especifican en Tabla 21. El flujo F5 corresponde a la suspensión de pulpa, sus propiedades se especifican en Tabla 22. Las propiedades físicas y termodinámicas del intercambiador de calor son idénticas a las del intercambiador de calor del difusor expuestas en Tabla 19.

Tabla 21: Propiedades agua refrigerante.

	Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
Agua						
	Pr	11,2		Número de Prandtl para agua a 5°C	Tabla de datos.	[35]
	ρ_a	999,9	$[kg/m^3]$	Densidad del agua a 5°C.	Tabla de datos.	[35]
	μ	0,00159	$[Pa \cdot s]$	Viscosidad dinámica del agua a 5°C.	Tabla de datos.	[35]
	k_a	0,571	$[W/m^{\circ}C]$	Conductividad térmica del agua 5°C	Tabla de datos.	[35]
	$T_{a,in}$	5	$[^{\circ}C]$	Temperatura del agua a la entrada del I.C.	Se requiere que la suspensión llegue a temperatura ambiente.	
	$c_{p,a}$	4205	$[j/kg^{\circ}C]$	Calor específico del agua a 5°C	Tabla de datos.	[35]
	v'_a	0,0852	$[m^3/s]$	Flujo de agua refrigerante.	Se considera igual al flujo de suspensión de pulpa.	
	v_a	22,715	$[m/s]$	Velocidad del agua a la entrada del I.C.	Se estima según flujo de agua y área transversal entre placas del I.C.	
	m'_a	85,173	$[kg/s]$	Flujo másico de agua	Según densidad del agua.	

Tabla 22: Propiedades suspensión de pulpa.

	Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
F5						
	h_{sp}	5542,61	$[W/m^2^{\circ}C]$	Coeficiente de convección local para la suspensión.	Debido a la falta de datos termodinámicos y cinéticos, se estima mediante bibliografía.	[34]
	$T_{sp,in}$	120	$[^{\circ}C]$	Temperatura suspensión a la entrada del I.C.	Proveniente del rompimiento celular en autoclave.	
	$T_{sp,out}$	25	$[^{\circ}C]$	Temperatura de salida de la suspensión de pulpa.	Temperatura necesaria para entrar a proceso de hidrólisis.	
	ρ_{sp}	1018,64	$[kg/m^3]$	Densidad de suspensión de pulpa	Se ponderan las densidades de los componentes de la corriente*.	
	v'_{sp}	0,0852	$[m^3/s]$	Flujo volumétrico de suspensión.	Se mantiene el flujo proveniente del difusor.	
	m'_{sp}	86,769	$[kg/s]$	Flujo másico de suspensión.		
	$c_{p,sp}$	2100	$[j/kg^{\circ}C]$	Calor específico promedio de la suspensión de pulpa.	Debido a la falta de datos, se considera un valor promedio de bibliografía.	[36]

	ΔT_{sp}	-95	[°C]	Diferencia de temperatura en la suspensión de pulpa.		
--	-----------------	-----	------	--	--	--

$$* \rho_{sp} = \frac{F5_{agua} \rho_a + F5_{sacarosa} \rho_{sac} + F5_{pulpa} \rho_p}{F5}$$

Según las tablas anteriores y las propiedades del I.C., es posible determinar el área de transferencia necesaria para enfriar la suspensión de pulpa desde 80 a 25 [°C] según Ecuación 60.

$$A = 74,591 [\text{m}^2]$$

Ecuación 61: Área total necesaria I.C.

Según el área de una placa (Tabla 19) se determina el número de placas necesarias.

$$N_p = \frac{A}{A_p} \cong 45$$

Ecuación 62: Número de placas necesarias.

En conclusión, se necesitan 1 intercambiador de 45 placas. Según el flujo de salida del equipo, el tiempo de operación es de 12 horas por ciclo batch.

8.9 Simulación de la hidrólisis y dimensionamiento del reactor enzimático

Acorde a [19], el mecanismo de reacción para la hidrólisis enzimática de la sacarosa es:

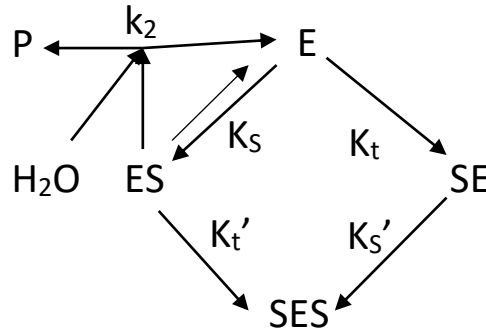


Ilustración 8: Mecanismo de reacción de la hidrólisis de la sacarosa mediante invertasa (también conocida como sacarasa), propuesto en [19].

Donde E es la enzima libre (invertasa, que posee dos sitios activos), ES corresponde al complejo activo enzima-sustrato (invertasa-sacarosa), SE y SES a complejos inactivos de la enzima (al crearse enlaces entre sacarosa y enzima que la inhiben), P a los productos de la hidrólisis (glucosa y fructosa) y k_2 , K_s , K_t , K_t' y K_s' las constantes cinéticas asociadas a cada reacción del mecanismo.

La cinética corresponde a aquella de inhibición por sustrato afecta a la concentración de agua “libre” (esto es, agua en la solución que no hidrata las moléculas de sacarosa, representado por el término $\frac{W_F}{W}$) según la siguiente ecuación:

$$-r_s = \frac{k_2 \cdot K_s \cdot E_0 \cdot Sac}{1 + (K_s + K_t) \cdot Sac + K_s \cdot K_t' \cdot Sac^2} \cdot \frac{W_F}{W}$$

Ecuación 63: Cinética de la reacción de hidrólisis enzimática propuesta [19].

Cabe señalar que cada molécula de sacarosa retiene 7 moléculas de agua, y ya que a altas concentraciones de este soluto las moléculas se encuentran menos hidratadas, se presume que se aglomeran, lo que causa un efecto de disminución en la velocidad de reacción[19]. Agrupando algunas constantes:

$$a_1 = k_2 K_s; \quad a_2 = K_s + K_t; \quad a_3 = K_s \cdot K_t'$$

Se obtiene:

$$-r_s = \frac{a_1 \cdot E_0 \cdot Sac}{1 + a_2 \cdot Sac + a_3 \cdot Sac^2} \cdot a_4$$

Ecuación 64: Cinética de la reacción e hidrólisis enzimática.

Ya que la sacarosa no entra, sale ni se genera, solo se consume, el balance de masa de sacarosa es:

$$\frac{d(Sac \cdot V)}{dt} = -r_s \cdot V$$

Ecuación 65: Balance de masa de sacarosa.

Asumiendo volumen constante y conversión inicial de la reacción nula, se deducen las integrales:

$$\int_0^t dt = \int_{Sac_0}^{Sac} \frac{1 + a_2 \cdot Sac + a_3 \cdot Sac^2}{a_1 \cdot a_4 \cdot E_0 \cdot Sac} dSac$$

$$\Rightarrow t = \frac{1}{a_1 \cdot a_4 \cdot E_0} [\ln(Sac) - \ln(Sac_0) + a_2 \cdot (Sac - Sac_0) + \frac{a_3}{2} \cdot (Sac^2 - Sac_0^2)]$$

Ecuación 66: Tiempo del proceso en función de la concentración de sacarosa.

En base a esta ecuación, se puede calcular a qué tiempo se obtiene cada concentración de sacarosa a partir de la inicial. Obteniendo estos datos se puede graficar concentración de sacarosa en función del tiempo, como se ve en la Ilustración 9. Cabe mencionar que se calcula el tiempo en función de la concentración porque no es posible despejar ésta de la ecuación al ser no lineal. Así, se graficó en Excel el tiempo calculado en el eje X y los pasos de concentración tomados en el eje Y para la sacarosa. Por estequiometría se deduce aquella de la glucosa y fructosa.

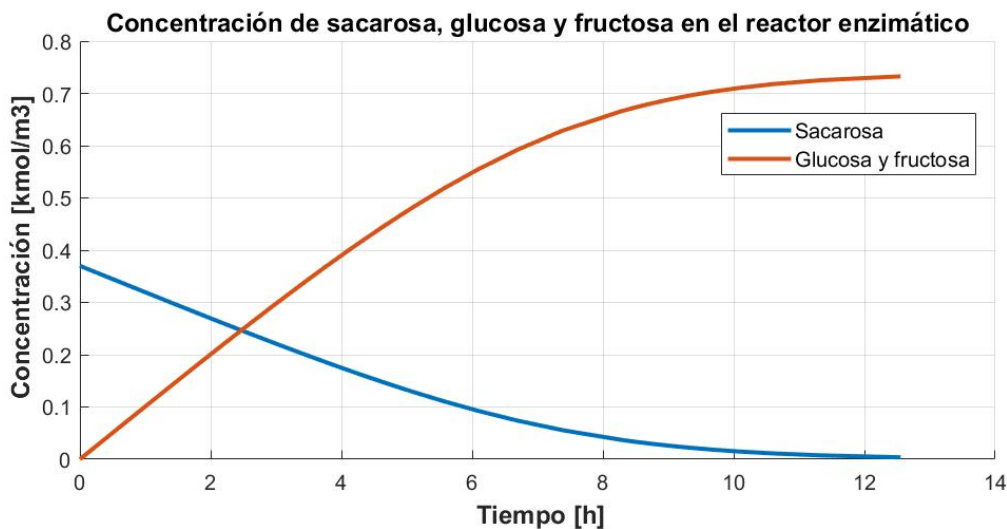


Ilustración 9: Concentración de sacarosa, glucosa y fructosa en función del tiempo.

Con lo obtenido en la simulación anterior, se obtiene que se alcanza una conversión del 99% de la sacarosa a glucosa y fructosa en 12,5 [h].

Respecto del dimensionamiento de este reactor, el volumen se calcula como moles iniciales dividido en concentración inicial de sacarosa. Según el balance de masa, esto equivale a:

$$V = \frac{n_s}{C_s} = \frac{1401717,6 \text{ [mol]}}{0,367 \left[\frac{\text{mol}}{\text{L}} \right]} = 3.819.394 \text{ [L]} = 3.819 \text{ [m}^3\text{]}$$

Ecuación 67: Dimensionamiento del reactor enzimático.

Ya que para reactores biológicos se sugiere utilizar una relación entre la altura y el diámetro de 3:1 [39], el diámetro del reactor se calcula a partir del volumen para una geometría cilíndrica:

$$D = \sqrt[3]{\frac{4V}{3\pi}} = 11,7 \text{ [m]}$$

Ecuación 68: Diámetro del reactor enzimático.

Así, la altura resulta:

$$Altura = 3 \cdot D = 35 [m]$$

Ecuación 69: Altura del reactor enzimático.

8.10 Diseño del filtro prensa

A continuación, se exponen las ecuaciones y supuestos considerados para el diseño del filtro prensa batch para la suspensión solido-líquido proveniente del biorreactor de hidrólisis.

La tasa de filtrado se define como:

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{1}{A} \frac{dV}{dt}$$

Ecuación 70: Velocidad de filtrado.

Por otra parte,

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{k}{l} \frac{\Delta P}{\mu}$$

Ecuación 71: Ecuación de Darcy.

Se define la resistencia al paso del líquido,

$$R = \frac{l}{k} = R_m + R_c$$

Ecuación 72: Resistencia total filtro prensa.

Reemplazando Ecuación 72 en Ecuación 71,

$$\frac{Q}{A} = \frac{\Delta P}{\mu(R_m + R_c)}$$

Ecuación 73.

Se define,

$$R_c = \beta C \frac{V}{A}$$

Ecuación 74: Resistencia de torta.

Como la torta generada es de naturaleza orgánica, se considera compresible según transcurre el proceso de filtrado,

$$\beta = \beta_o (\Delta P)^s$$

Ecuación 75: Coeficiente de resistencia específico.

Reemplazando Ecuación 75 en Ecuación 74,

$$R_c = \beta_o (\Delta P)^s C \frac{V}{A}$$

Ecuación 76.

Reemplazando Ecuación 76 en Ecuación 73 y reordenando:

$$\frac{dt}{dV} = \frac{\mu \beta_o (\Delta P)^s C}{\Delta P A^2} + \frac{R_m \mu}{\Delta P A}$$

Ecuación 77: Ecuación de diseño forma diferencial.

Integrando y reordenando:

$$\int_0^t dt = \int_0^V \frac{\mu \beta_o (\Delta P)^s C}{\Delta P A^2} dv + \frac{R_m \mu}{\Delta P A}$$

Ecuación 78: Ecuación de diseño forma integral.

$$\frac{At}{V} = \frac{\mu \beta_o (\Delta P)^s C V}{2 \Delta P A} + \frac{R_m \mu}{\Delta P}$$

Ecuación 79: Ecuación de diseño filtro prensa, torta compresible presión constante.

Se desprecia la resistencia del medio bajo el supuesto de que la torta genera una resistencia significativamente mayor que la del medio, debido a su mayor anchura y tortuosidad. Desde este punto y reordenando, se obtiene la ecuación de área de filtrado:

$$A = \left(\frac{\mu \beta_o C V^2}{2t(\Delta P)^{1-s}} \right)^{0,5}$$

Ecuación 80: Área de filtrado

Según supuestos y complemento bibliográfico es posible definir los datos necesarios para el dimensionamiento del filtro. Se expresan en la Tabla 23.

Tabla 23: Datos filtro prensa.

Dato	Valor	Unidad	Descripción	Supuesto	Ref.
μ	0,000891	[Pa seg]	Viscosidad del agua a 25°C	Tabla de datos.	[35]
ρ_p	0,21	[ton/m ³]	Densidad de la pulpa.	Tabla de datos.	[40]
ρ_a	1	[ton/m ³]	Densidad del agua a 25°C.	Tabla de datos.	[35]
ρ_{sac}	1,59	[ton/m ³]	Densidad de la sacarosa.	Tabla de datos.	[41]
ρ_g	1,56	[ton/m ³]	Densidad de la glucosa.	Tabla de datos.	[42]
β_o	1,38e10	[m/kgPa ^s]	Coefficiente de resistencia específica.	Se considera que la pulpa es principalmente pectina.	[43]
t	36000	[seg]	Tiempo de filtrado.	Se escoge según inspección.	
ΔP	600000	[Pa]	Caída de presión en la torta.	Se estima según filtro prensa del mercado.	[44]
s	0,38		Factor de compresibilidad de la pulpa.	Se considera que la pulpa es principalmente pectina.	[43]
E_f	0,999		Eficiencia de filtrado.	Evitar cantidades elevadas de sólidos en destilación.	

Según los datos expuestos y el balance de masa es posible determinar el volumen de filtrado total y la masa de torta por volumen filtrado.

Tabla 24: Variables diseño filtro.

Variable	Valor	Unidad	Descripción	Ecuación
C	81,12	[kg/m ³]	Masa de torta por volumen filtrado.	$\frac{F7_{pulp}(1 - E_f)}{V}$
V	3323,585	[m ³]	Volumen total de filtrado.	$\frac{F9_{pulp}}{\rho_p} + \frac{F9_{agua}}{\rho_a} + \frac{F9_{sac}}{\rho_{sac}} + \frac{F9_{gluc}}{\rho_g}$
V_t	709,5370	[m ³]	Volumen total de torta.	$\frac{F8_{pulp}}{\rho_p^{1-s}}$

Reemplazando los datos y variables en la ecuación de diseño se obtiene el área total de filtrado.

$$A = 6326,509 \text{ [m}^2\text{]}$$

Ecuación 81: Área total de filtrado.

Según el mercado, los filtros prensa de mayor magnitud tiene un área cercana a los 1000 metros cuadrado [44], por lo cual se decide trabajar con 7 filtros iguales en paralelo de $A_f = 903,787 \text{ [m}^2\text{]}$ cada uno. Según el mercado, los filtros prensa de mayor magnitud tiene un área cercana a los 1000 [m²] [44], por lo cual se decide trabajar con 7 filtros iguales en paralelo de $A_f = 903,787 \text{ [m}^2\text{]}$ cada uno. El tiempo de operación es de 10 horas y cada filtro tiene ancho máximo de torta determinado por la ecuación 44.

$$l_t = \frac{V_t}{7 \cdot A_f} = 0,1122 \text{ [m]}$$

Ecuación 82: Ancho de torta por filtro.

Valor razonable según bibliografía [45] (entre 0,03 y 0,2 [m]).

8.11 Simulación cinética de crecimiento en cultivo de bacterias

Se simuló el crecimiento de las bacterias en cultivo en MATLAB, adjuntándose a continuación el código implementado.

8.11.1 Código Matlab, programa principal de ejecución

```
%% Programa Principal Cultivo de Bacterias
close all
clear all
clc
%% Produccion de Butanol
%%Integrantes: Franco Corsini
%              Javiera Farias
%              Renan Pulquillanca
%              Vanessa Vargas
%%
P.u=0.6006; %[1/h]
P.Y_xs=0.1088; % [g/g]
P.alpha=0.1; %[1/h]

%% Condiciones Iniciales
Sg0=120; % Concentracion Inicial de Glucosa
X0=0.2; % Concentracion Inicial de Celulas

tspan= [0 8];
CI=[Sg0 X0]; % Vector de condiciones iniciales

[t, y] = ode23s(@(t,y) odevane(t,y,P), tspan, CI);
%% Grafico de concentraciones de bacteria y glucosa
hold on
plot(t,y(:,1),'linewidth',3)
plot(t,y(:,2),'linewidth',3)
xlabel('\bf Tiempo [h]', 'FontSize',18)
ylabel('\bf Concentracion [g/l]', 'FontSize',18)
title('Cultivo Bacteria Clostridium acetobutylicum ATCC
824', 'FontSize',20)
grid on
l=legend('Glucosa','Bacteria')
l.FontSize = 15;
```

8.11.2 Balance de glucosa y microorganismos

```
function dy=odes(t,y,P)
Sg=y(1); % Concentracion de Glucosa
X=y(2); % Concentracion de Bacteria
dy=zeros(2,1);
dy(1)=-(P.u*X)/(P.Y_xs); % Balance masa de Glucosa
dy(2)=(P.u-P.alpha)*X; % Balance de masa de Celulas
```

end

8.11.3 Resultados de simulación de cultivo de bacteria *Clostridium acetobutylicum*

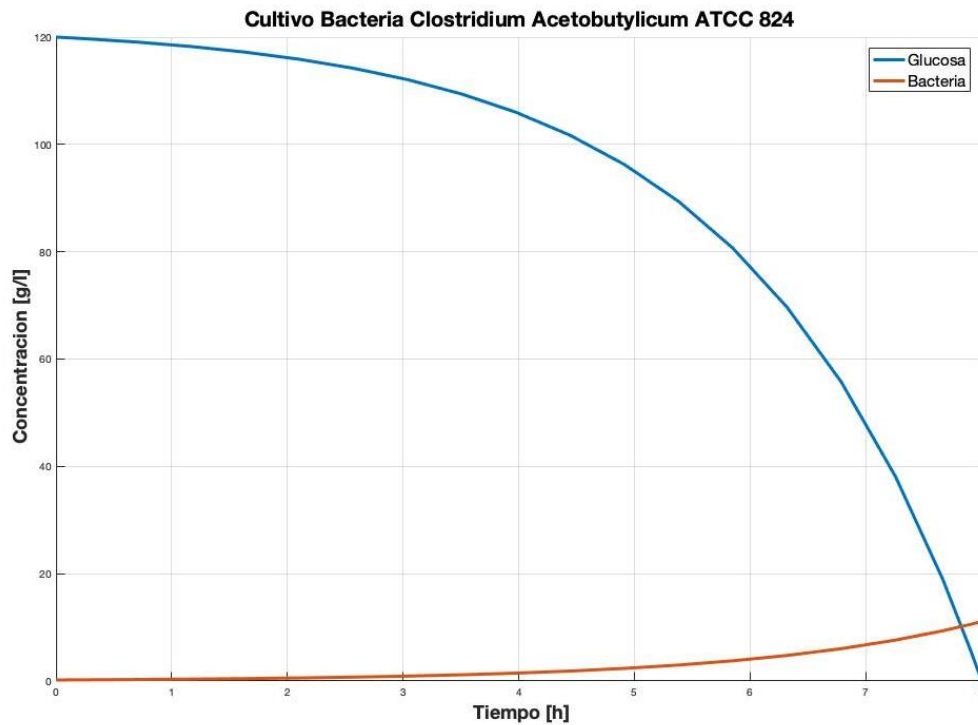


Ilustración 10: Resultados de simulación en cultivo de crecimiento de microorganismos.

8.12 Dimensionamiento de reactor de cultivo

Se utiliza la siguiente ecuación:

$$V = \frac{m_{bacterias}^{fermentación}}{C_{bacterias}^{salida}}$$

Ecuación 83: Ecuación de diseño de biorreactor

Reemplazando con la masa de bacterias necesarias en la fermentación y la concentración de salida obtenida de la simulación, se tiene:

$$V = \frac{50 [kg]}{10[g/L]} = 5[m^3]$$

Además, existe una relación 3:1 entre Altura y Diámetro, por lo tanto:

$$V = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot h$$

Ecuación 84: Cálculo de volumen de reactor.

$$h = 3 \cdot D$$

Ecuación 85: Relación altura-diámetro en reactor biológico.

Reemplazando, se tiene:

$$V = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot 3D \rightarrow V = \pi \frac{3D^3}{4}$$

$$5 = \pi \frac{3D^3}{4} \rightarrow D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 5}{3 \cdot \pi}} \rightarrow D = 1,29 [m]$$

Ecuación 86: Diámetro del reactor de cultivo.

$$h = 3 \cdot 12.85 [m] \rightarrow h = 3,86 [m]$$

Ecuación 87: Altura del reactor de cultivo.

Se concluye que las dimensiones del reactor, de geometría cilíndrica, serían de 1,29 [m] de diámetro y 3,86 [m] de altura.

8.13 Leyes Cinéticas en Fermentación ABE

A continuación, se presentan las leyes cinéticas correspondiente al proceso de fermentación ABE extraídas desde fuentes bibliográficas [18] para un reactor batch. Cabe señalar que la bacteria *Clostridium acetobutylicum* usa como sustrato la glucosa (Sg) para su crecimiento, y genera como productos acetona, butanol y etanol.

La velocidad de reacción de biomasa se presenta en la Ecuación 88, donde se considera la ecuación de Monod para el crecimiento de las bacterias. Además, se debe mencionar que las bacterias *Clostridium acetobutylicum* sufren inhibiciones por altas concentraciones de sustrato (Sg) y por producto butanol (But) [46], efectos que se consideran al momento de construir las leyes cinéticas. Además de la entrada de remolacha y bacterias al fermentador, se agrega ácido butírico y ácido acético, para alcanzar mayores conversiones de ABE y reducir el efecto de inhibición por producto. [47].

Desde la Ecuación 88 hasta la Ecuación 93, se presentan las velocidades de reacción de butanol, ácido butírico, acetona, ácido acético, y etanol respectivamente. [18]

$$\mu_x = \eta_1 \left(\mu_{max} \left(\frac{Sg}{k_{Sg} + Sg} \right) \left(\frac{1}{1 + \frac{But}{k_{But}}} \right) \left(1 - \left(\frac{Sg}{k_{Si}} \right) \right) \right)$$

Ecuación 88: Velocidad de reacción de Biomasa

$$r_{But} = \eta_2 \left(v_{maxBut} \left(\frac{Sb}{k_{Sb} + Sb} \right) \right)$$

Ecuación 89: Velocidad de reacción de Butanol.

$$r_{Sb} = \eta_3 \left(v_{maxSb} \left(\frac{Sg}{k_{SgSb} + Sg} \right) \left(\frac{1}{1 + \frac{But}{k_{But}}} \right) \right) - \eta_2 \left(\frac{v_{maxBut} \left(\frac{Sb}{k_{Sb} + Sb} \right)}{Y_{ButSb}} \right)$$

Ecuación 90: Velocidad de reacción de Ácido Butírico.

$$r_{Ace} = \eta_4 \left(v_{maxAce} \left(\frac{Act}{k_{AA} + Act} \right) \right)$$

Ecuación 91: Velocidad de reacción de Acetona.

$$r_{Act} = \eta_5 \left(v_{maxAct} \left(\frac{Sg}{k_{SgAct} + Sg} \right) \cdot \left(\frac{1}{1 + \frac{Ace}{k_{iAce}}} \right) \right) - \eta_4 \left(\frac{v_{maxAce} \left(\frac{Act}{k_{AA} + Act} \right)}{Y_{AceAct}} \right)$$

Ecuación 92: Velocidad de reacción de Ácido Acético.

$$r_{Et} = \eta_6 * \left(v_{maxEt} \cdot \left(\frac{Sg}{k_{SgEt} + Sg} \right) \right)$$

Ecuación 93: Velocidad de reacción de Etanol.

Por último, se presentan los balances de masa en el reactor batch de fermentación para la glucosa, biomasa, butanol, ácido butírico, ácido acético, acetona y etanol respectivamente.

$$\frac{dSg}{dt} = -\left(\frac{\mu_X}{Y_{XSg}}\right)$$

Ecuación 94: Balance de masa de Glucosa.

$$\frac{dX}{dt} = (\mu_X - k_d) \cdot X$$

Ecuación 95: Balance de masa de Biomasa.

$$\frac{dBut}{dt} = r_{But} \cdot X$$

Ecuación 96: Balance de Butanol.

$$\frac{dSb}{dt} = r_{Sb} \cdot X$$

Ecuación 97: Balance de Ácido Butírico.

$$\frac{dAct}{dt} = r_{Act} \cdot X$$

Ecuación 98: Balance Ácido Acético.

$$\frac{dAce}{dt} = r_{Ace} \cdot X$$

Ecuación 99: Balance de Acetona.

$$\frac{dEt}{dt} = r_{Et} \cdot X$$

Ecuación 100: Balance de Etanol.

8.14 Código Matlab y resultados de simulación de la fermentación.

A partir de las leyes cinéticas presentadas en Leyes Cinéticas en Fermentación ABE, se resuelven las ecuaciones diferenciales.

8.14.1 Programa principal de ejecución

```
close all
clear all
clc

%% Produccion de Bio-Butanol

%% Integrantes:
%           Franco Corsini
%           Javiera Farias
%           Renan Pulquillanca
%           Vanessa Vargas
%% Año 2018
%% Estructura de Parametros para cinetica de reaccion
P.k_AA=3.7924;      % [g/l] Constante de afinidad del acido acetico
P.k_But=9.8772;     % [g/l] Cte de inhibicion de crecimiento por Butanol
P.k_d=0.1;          % [1/h] Constante de muerte de las bacterias
P.ki_Ace=16.4454;   % [g/l] Constante de inhibicion por acetona
P.k_Sb=3.5;         % [g/l] Constante de afinidad Butanol-Acido butirico
P.k_Sg=25;          % [g/l] Constante de afinidad de la glucosa
P.k_SgAct=0.5;      % [g/l] Constante de afinidad Glucosa-Acido acetico
P.k_SgEt=0.0726;    % [g/l] Constante de afinidad Glucosa-Etanol
P.k_SgSb=2.51;      % [g/l] Constante de afinidad Glucosa-Acido butirico
P.k_Si=240.5;       % [g/l] Constante de inhibicion por glucosa
P.vmax_Ace=0.6361;  % [1/h] Vel. esp de produccion max acetona
P.vmax_Act=0.3349;  % [1/h] Vel. Esp. de produccion max acido acetico
P.vmax_But=0.9949;  % [1/h] Vel. Esp. de produccion max Butanol
P.vmax_Et=0.0638;   % [1/h]
P.vmax_Sb=0.7159;   % [1/h]
P.u_max=0.6003;     % [1/h]
P.Y_AceAct=0.4182;  % [g/g]
P.Y_ButSb=0.4852;   % [g/g]
P.Y_XSg=0.1088;     % [g/g]
P.n1=1;             % [ ]
P.n2=1;             % [ ]
P.n3=1;             % [ ]
P.n4=1;             % [ ]
P.n5=1;             % [ ]
P.n6=0.9;           % [ ]

%% Condiciones Iniciales
```

```

Sg0=100;           % [g/l]Concentracion Inicial de Glucosa
X0=0.01;           % [g/l]Concentracion Inicial de Celulas
But0=0.01;         % [g/l]Concentracion Inicial de Butanol
Sb0=0;             % [g/l]Concetracion Inicial de Acido Butirico
Act0=0.01;         % [g/l]Concentracion Inicial de Acido Acetico
Ace0=0.01;         % [g/l]Concentracion Inicial de Acetona
Et0=0.01;          % [g/l]Concentracion Inicial Etanol
tspan= [0 100];    % [h] Tiempo
CI=[Sg0 X0 But0 Sb0 Act0 Ace0 Et0];% Condiciones Iniciales

%% Resolver ODEs
[t, y] = ode23s(@(t,y) odes(t,y,P), tspan, CI);

%% Grafico de curvas de concentracion en el tiempo de cada especie
hold on
plot(t,y(:,1),'linewidth',2.5) %Grafico de Glucosa
yyaxis left
xlabel('\bf Tiempo [h]','FontSize',17)
ylabel('\bf Concentracion [g/l]','FontSize',17,'Color','k')
plot(t,y(:,2),'linewidth',2.5) %Grafico de Celulas
yyaxis right
plot(t,y(:,3),'linewidth',2.5) %Grafico de Butanol
yyaxis right
ylim([0 20])
plot(t,y(:,6),'linewidth',2.5) %Grafico de Acetona
yyaxis right
plot(t,y(:,7),'linewidth',2.5) %Grafico de Etanol
yyaxis right
ylabel('\bf Biomasa, Productos [g/l]','FontSize',17)
title('Fermentacion ABE usando Bacteria Clostridium acetobutylicum ATCC
824','Color','black','FontSize',18)
grid on
l=legend('Glucosa','Bacteria','Butanol','Acetona','Etanol');
l.FontSize = 16;

```

8.14.2 Velocidades cinéticas y balances de masa en Matlab

```

function dy=odes(t,y,P)
%% Concentraciones de las especies en fermentacion ABE
Sg=y(1); % Concentracion de Glucosa
X=y(2); % Concentracion de Bacteria
But=y(3); % Concentracion de Butanol
Sb=y(4); % Concentracion de Acido Butirico
Act=y(5); % Concentracion de Acido Acetico
Ace=y(6); % Concentracion de Acetona
Et=y(7); % Concentracion de Etanol

dy=zeros(7,1); %Vector de ceros donde se guardaran las edos

%% Velocidades de reaccion de las especies de fermentacion ABE

% Velocidad de reaccion de Biomasa
u_x=P.n1*(P.u_max*(Sg/(P.k_Sg+Sg))*(1/(1+But/P.k_But))*(1-(Sg/P.k_Si)));

```

```

% Velocidad de reaccion de Butanol
rBut=P.n2*(P.vmax_But*(Sb/(P.k_Sb+Sb)));

% Velocidad de reaccion de Acido Butirico
rSb=P.n3*(P.vmax_Sb*(Sg/(P.k_SgSb+Sg))*(1/(1+(But/P.k_But)))-
P.n2*(P.vmax_But*(Sb/(P.k_Sb+Sb)))/P.Y_ButSb;

% Velocidad de reaccion de Acetona
rAce=P.n4*(P.vmax_Ace*(Act/(P.k_AA+Act)));

%Velocidad de reaccion de Acido Acetico
rAct=P.n5*(P.vmax_Act*(Sg/(P.k_SgAct+Sg))*(1/(1+Ace/P.ki_Ace)))-
P.n4*(P.vmax_Ace*(Act/(P.k_AA+Act)))/P.Y_AceAct;

%Velocidad de reaccion de Etanol
rEt=P.n6*(P.vmax_Et*(Sg/(P.k_SgEt+Sg)));

%% Balances de masa para sustratos y productos

dy(1)=-(u_x*X/P.Y_XSg); % Balance masa de Glucosa
dy(2)=(u_x-P.k_d)*X; % Balance de masa de Celulas
dy(3)=rBut*X; % Balance de masa de Butanol
dy(4)=rSb*X; % Balance de masa de Acido Butirico
dy(5)=rAct*X; % Balance de masa de Acido Acetico
dy(6)=rAce*X; % Balance de masa de Acetona
dy(7)=rEt*X; % Balance de masa de Etanol
end

```

Por último, se realiza la simulación del proceso de fermentación ABE, con el objetivo de alcanzar la máxima conversión de glucosa y concentración de butanol, por lo tanto, se obtiene que la concentración inicial de S_0 alimentada al reactor es de 100 [g/l]. Los resultados se muestran en la Ilustración 11.

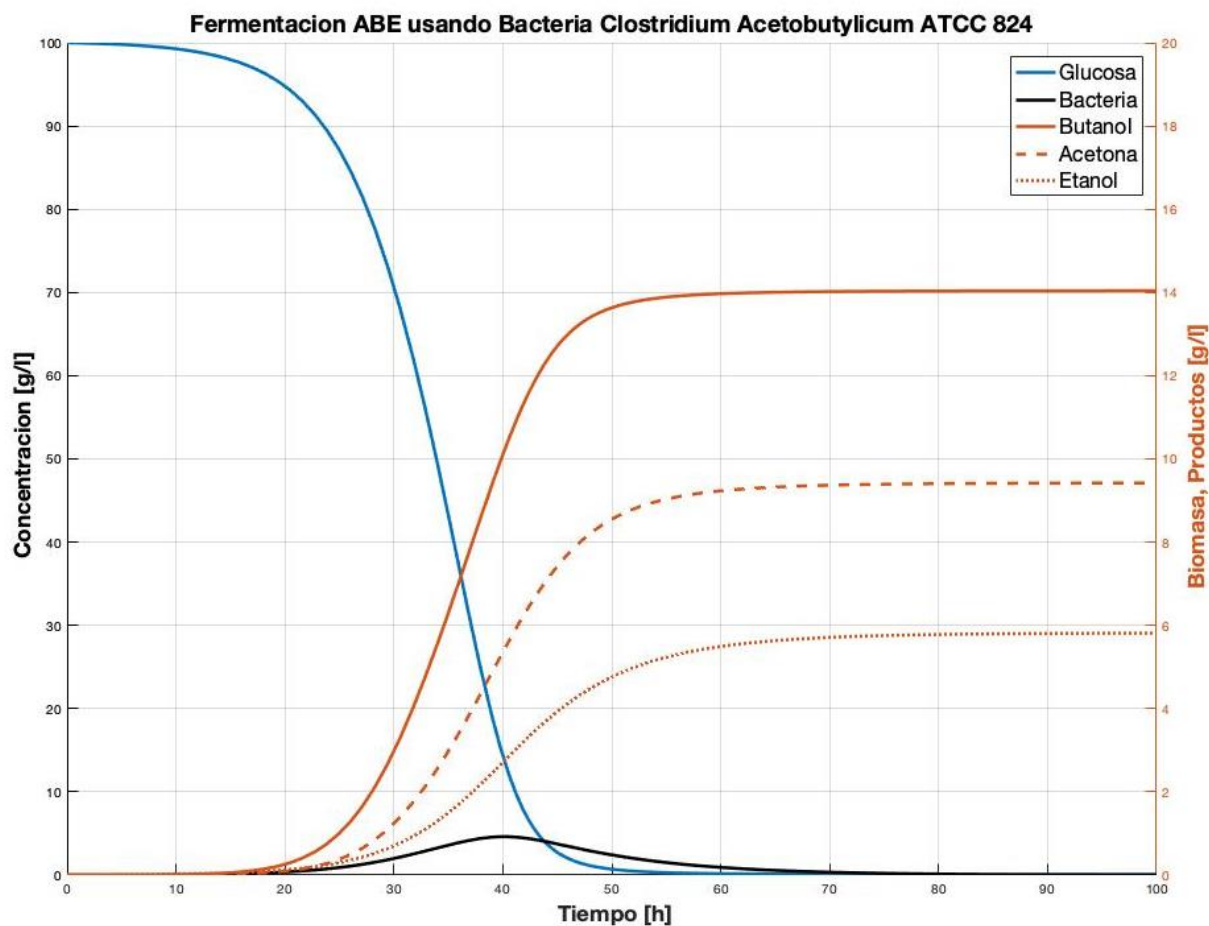


Ilustración 11: Resultados de Simulación Fermentación ABE, Concentración inicial de glucosa 100 [g/l].

8.15 Dimensionamiento del fermentador

De manera de procesar la mayor cantidad de remolacha en la menor cantidad de líneas de producción, se escogió el reactor de mayor tamaño disponible para un proceso batch, que es 5.000 [m³] [48], debido a que esta es la etapa limitante de la producción. Este opera por 60 horas, la relación altura:diámetro es 3:1 para reactores biológicos [49]. El volumen queda determinado a partir de la siguiente ecuación, considerando el equipo como un cilindro.

$$V = \pi \cdot \frac{D^2}{4} \cdot h$$

Ecuación 101: Cálculo de volumen de reactor.

$$h = 3 \cdot D$$

Ecuación 102: Relación altura-diámetro en reactor biológico.

Reemplazando la Ecuación 101 en la Ecuación 102, se obtiene:

$$V = \pi \cdot \frac{D^2}{4} 3D \rightarrow V = \pi \frac{3D^3}{4}$$
$$5.000 = \pi \frac{3D^3}{4} \rightarrow D = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 5.000}{3 \cdot \pi}} \rightarrow D = 12,85 [m]$$
$$h = 3 \cdot 12,85 [m] \rightarrow h = 38,55 [m]$$

Por lo tanto, las dimensiones del reactor biológico son: altura 38,55 [m] y diámetro 12,85 [m].

8.16 Dimensionamiento del pervaporador

En esta operación unitaria se separan los componentes orgánicos: acetona, butanol y etanol, del agua. Se considera una pervaporación con membrana hidrofóbica, la cual permite el paso de los alcoholes y acetona, mientras que el agua tiene difusión restringida a través del equipo [50], es decir, la totalidad de los compuestos orgánicos se pervaporan mientras que el agua se pervapora en baja cantidad.

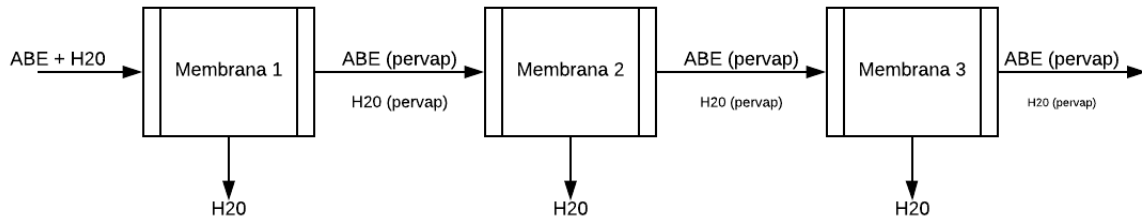


Ilustración 12: Pervaporación de ABE

Para el dimensionamiento se considera que la mezcla ABE es totalmente soluble en agua, por lo tanto, la cantidad de agua se repartirá proporcionalmente en el equipo de pervaporación en cada mezcla binaria de la especie i con el agua. Es decir, por comodidad de análisis, se considerará que la mezcla cuaternaria ABE-Agua, corresponde a 3 mezclas binarias: Acetona-Agua, Butanol-Agua y Etanol-Agua, donde cada una posee afinidad distinta con la membrana.

$$m_{i, H_2O} = x_i \cdot m_{H_2O} = \frac{m_i}{m_{T ABE}} \cdot m_{H_2O}$$

Ecuación 103: Masa de agua según componente i .

Considerando el siguiente balance de masa:

Tabla 25: Balance de masa en pervaporador.

Flujo	Nombre	Cantidad [ton]
F17	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	2973,74
	Sacarosa	4,80
	Total	3126,54
F18	Agua	2973,63
	Sacarosa	4,80
	Total	2978,43
F19	Butanol	70,50
	Etanol	29,50
	Acetona	48,00
	Agua	0,1037522382
	Total	148,10

Se determina la masa de agua en cada mezcla binaria,

$$m_{But, H_2O} = \frac{70,5}{(70,5 + 29,5 + 48)} \cdot 2973,739 [ton] = 1416,54 [ton]$$

Ecuación 104: Agua en butanol.

$$m_{Et, H_2O} = \frac{29,5}{(70,5 + 29,5 + 48)} \cdot 2973,739 [ton] = 592,739 [ton]$$

Ecuación 105: Agua en etanol.

$$m_{Ac, H_2O} = \frac{48}{(70,5 + 29,5 + 48)} \cdot 2973,739 [ton] = 964,456 [ton]$$

Ecuación 106: Agua en acetona.

A continuación, se define el factor de separación o selectividad de la especie i con el agua mediante la Ecuación 107.

$$\alpha_{i, H_2O} = \frac{\left(\frac{m_{f,tot}}{m_{f,i}}\right) \left(\frac{m_{p,tot}}{m_{p,H_2O}}\right)}{\left(\frac{m_{f,tot}}{m_{f,H_2O}}\right) \left(\frac{m_{p,tot}}{m_{p,i}}\right)} = \left(\frac{m_{f,H_2O}}{m_{f,i}}\right) \cdot \left(\frac{m_{p,i}}{m_{p,H_2O}}\right)$$

Ecuación 107: Selectividad de la especie i sobre el agua en la membrana de pervaporación.

Se toma como supuesto que la especie i pervaporada es igual a la alimentada, es decir, $m_{f,i} = m_{p,i}$, por lo tanto, se obtiene:

$$\alpha_{i, H_2O} = \frac{m_{f, H_2O}}{m_{p, H_2O}}$$

Ecuación 108: Selectividad simplificada.

A partir de datos bibliográficos, se obtiene el factor de separación para las especies butanol y etanol en agua [50]. Con ello se determina la cantidad de etapas de pervaporación requeridas para obtener una mezcla binaria de etanol, con un porcentaje menor a 1 % de agua [51]. Cabe destacar, que el número de etapas es determinado por la pervaporación de etanol, ya que es la molécula con una menor selectividad [50].

$$\alpha_{Et, H_2O} = 18$$

Por lo tanto, se obtiene la masa de agua pervaporada en la primera etapa.

$$\rightarrow m_{H_2O, perv 1} = \frac{m_{f, H_2O}}{18} = 32,93 [ton]$$

Ecuación 109: Primera pervaporación de etanol-agua.

Para una segunda pervaporación, se determina la segunda masa de agua pervaporada.

$$m_{H_2O, perv 2} = \frac{32,93}{18} [ton] = 1,83 [ton]$$

Ecuación 110: Segunda pervaporación de etanol-agua.

Por último, para una tercera pervaporación se determina la cantidad de agua pervaporada.

$$m_{H_2O, perv 3} = \frac{1,83}{18} [ton] = 0,1 [ton]$$

Ecuación 111: Tercera pervaporación de etanol-agua.

La cual cumple las condiciones asociadas al Artículo 4 para la producción de Bioetanol, según la ley de Chile [51], por lo cual se necesita una pervaporación de triple efecto como se observa en la Ilustración 12.

A continuación, se determina cantidad de agua pervaporada en la mezcla binaria con butanol para tres etapas:

$$\alpha_{but, H_2O} = 104 \rightarrow m_{H_2O, perv 1} = \frac{m_{f, H_2O}}{104} = 13,62 [ton]$$

Ecuación 112: Primera pervaporación de butanol-agua.

Para una segunda pervaporación, se determina la masa de agua pervaporada

$$m_{H_2O, perv 2} = \frac{13,62}{104} [ton] = 0,13 [ton]$$

Ecuación 113: Segunda pervaporación de butanol-agua.

Por último, para una tercera pervaporación se determina la cantidad de agua pervaporada.

$$m_{H_2O, perv 3} = \frac{0,13}{104} [ton] = 1,25 \cdot 10^{-3} [ton]$$

Ecuación 114: Tercera pervaporación de butanol-agua.

Por otro lado, se asume que la selectividad o factor de separación del butanol y la acetona son similares, es decir, $\alpha_{But} \approx \alpha_{Ace}$ [52]. Así se determina la cantidad de agua pervaporada para la mezcla binaria acetona-agua.

$$\alpha_{Ace, H_2O} = 104 \rightarrow m_{H_2O, perv 1} = \frac{m_{f, H_2O}}{104} = 9,27 [ton]$$

Ecuación 115: Primera pervaporación acetona-agua.

$$m_{H_2O, perv 2} = \frac{9,27}{104} [ton] = 0,089 [ton]$$

Ecuación 116: Segunda pervaporación acetona-agua.

$$m_{H_2O, perv 3} = \frac{0,089}{104} [ton] = 8,57 \cdot 10^{-4} [ton]$$

Ecuación 117: Tercera pervaporación acetona-agua.

A continuación, se determina el área de la membrana necesaria para separar la mezcla ABE del agua a partir de la Ecuación 118, donde se despeja el área y se obtiene la Ecuación 119.

$$J_i = \frac{m_i}{A \cdot t}$$

Ecuación 118: Flux de la especie i en una membrana de pervaporación.

$$A = \frac{m_i}{J_i \cdot t}$$

Ecuación 119: Área de filtración en la pervaporación para la especie i .

Donde m_i corresponde a la masa total del componente i .

Según bibliografía [50], se tiene que los flux de etanol y butanol son idénticos, según este punto, se toma el supuesto que la acetona también cumple esta igualdad.

$$J_{ace} = J_{but} = J_{et} = 9,5 \left[\frac{kg}{m^2 h} \right]$$

Ecuación 120: Flux de componentes según bibliografía.

Por otra parte, según el balance de masa, se observa que el mayor flujo másico entre los componentes orgánicos corresponde al butanol, esto implica que el mayor requerimiento de área de membrana proviene de la separación del butanol. Bajo este punto, el área de membrana queda determinada según el área necesaria para pervaporar el butanol y un tiempo de operación igual a 10 horas, seleccionado mediante inspección.

$$A_{mem} = 742,11 [m^2]$$

Ecuación 121: Área de membrana de pervaporación.

En conclusión, se necesita un equipo de pervaporación de triple efecto, donde cada efecto requiere de un área de membrana igual 742,11 [m²]. Según el cálculo realizado para cada etapa de pervaporación, se determina la cantidad de agua pervaporada, siendo igual a la suma de la masa de agua en la tercera pervaporación de cada componente.

$$m_{tot, H_2O, perv} = 8,57 \cdot 10^{-4} [ton] + 1,25 \cdot 10^{-3} [ton] + 0,1 [ton] = 0,102 [ton]$$

Ecuación 122: Masa de agua pervaporada.

Por otra parte, se tiene que la masa total de orgánicos pervaporados es,

$$m_{tot,org,perv} = 48 [ton] + 70,5 [ton] + 20,5 [ton] = 148 [ton]$$

Ecuación 123: Masa de orgánicos pervaporados.

De esta manera el porcentaje de agua en la mezcla pervaporada es de 0,07%, lo cual facilita en gran medida la siguiente operación (separación de los componentes orgánicos mediante destilación).

8.17 Dimensionamiento de las torres de destilación

Para dimensionar torres de destilación se utiliza el método de McCabe-Thiele, un método gráfico que utiliza un equilibrio líquido-vapor de las especies a separar

Torre 1

Se utiliza el equilibrio Acetona-Etanol. Se trabaja a 4 veces la razón de reflujo mínimo, que se obtiene de la recta de enriquecimiento, según las siguientes ecuaciones:

$$y = \frac{R_r}{R_r + 1} x_n + \frac{x_{Di}}{R_r + 1}$$

Ecuación 124: Recta de rectificación

$$y = \frac{L'_{iqi}}{V'_{api}} x_n - \frac{F_i}{V'_{api}} x_{Bi}$$

Ecuación 125: Recta de agotamiento

Así, se conforma gráficas, donde las líneas de pendiente infinita corresponden a la fracción volumétrica de la cola, alimentación y cabeza, respectivamente. Detalles en Ilustración 13

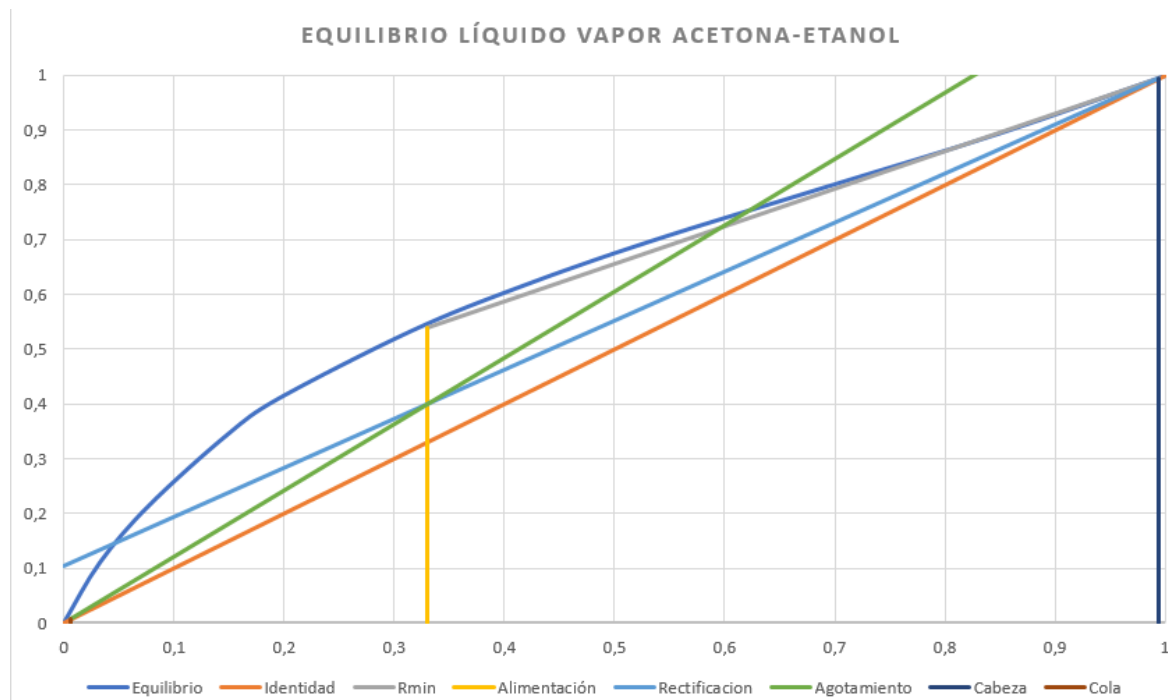


Ilustración 13: Equilibrio Etanol-Acetona y rectas de operación

Para contabilizar los platos necesarios, se realiza el método mostrado en la Ilustración 14, obteniéndose 14 platos más un recalentador para obtener la pureza necesaria.

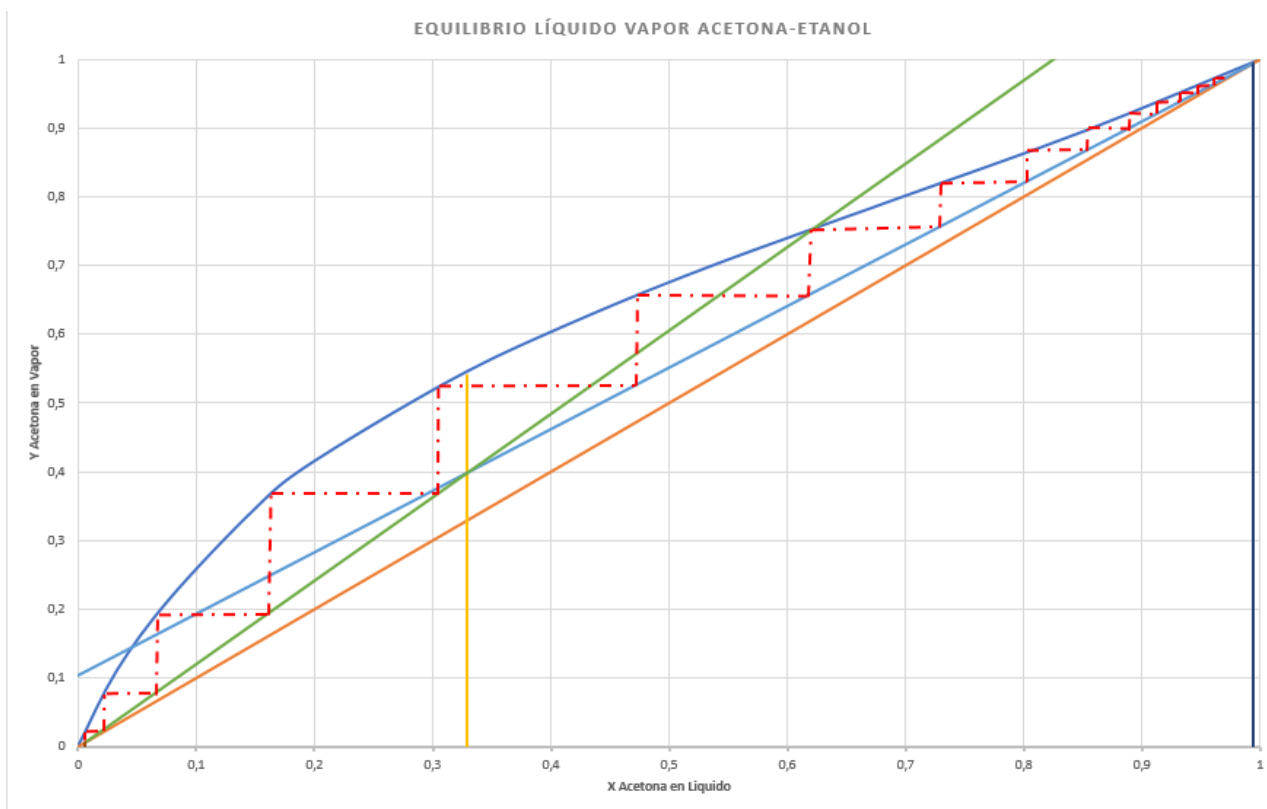


Ilustración 14: Método McCabe Thiele para torre 1

Torre 2

Se realiza un procedimiento análogo a la torre 1, obteniéndose la Ilustración 15

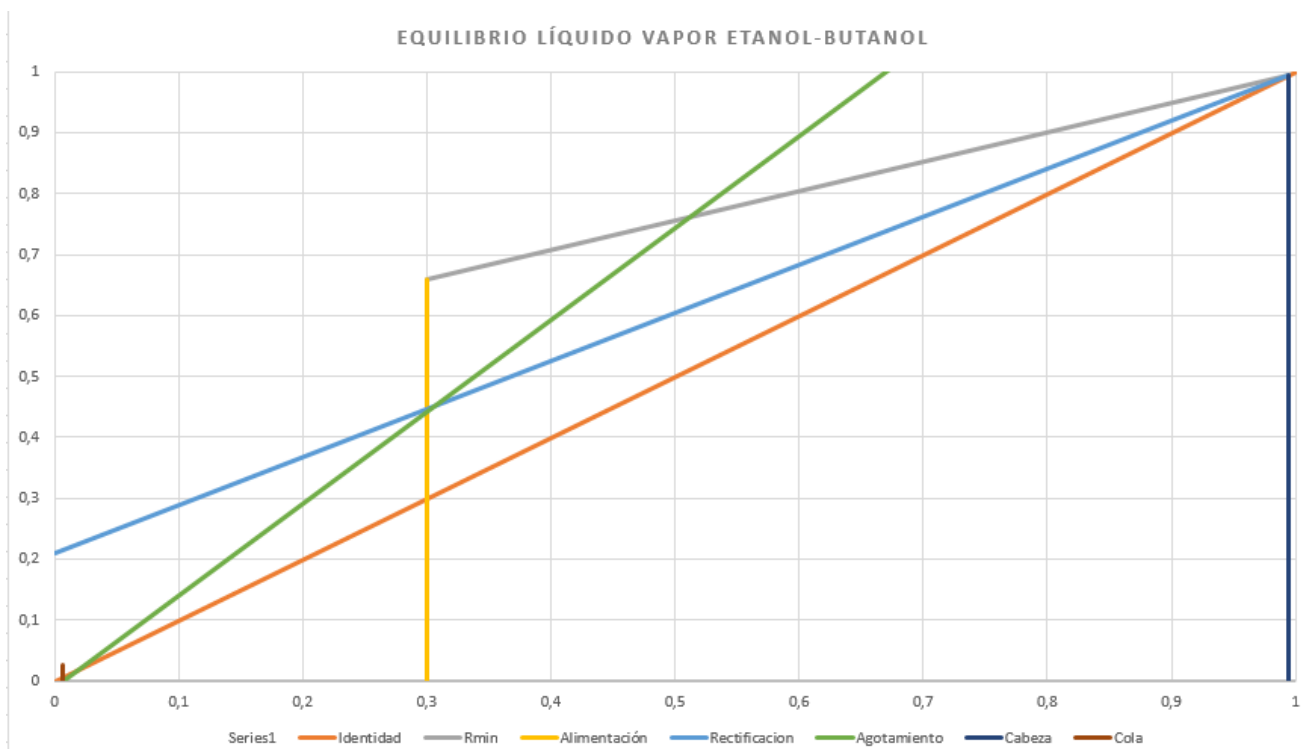


Ilustración 15: Equilibrio Etanol-Butanol y rectas de operación

Nuevamente se obtienen 7 platos más un recalentador para producir a la pureza necesaria, como muestra la Ilustración 16

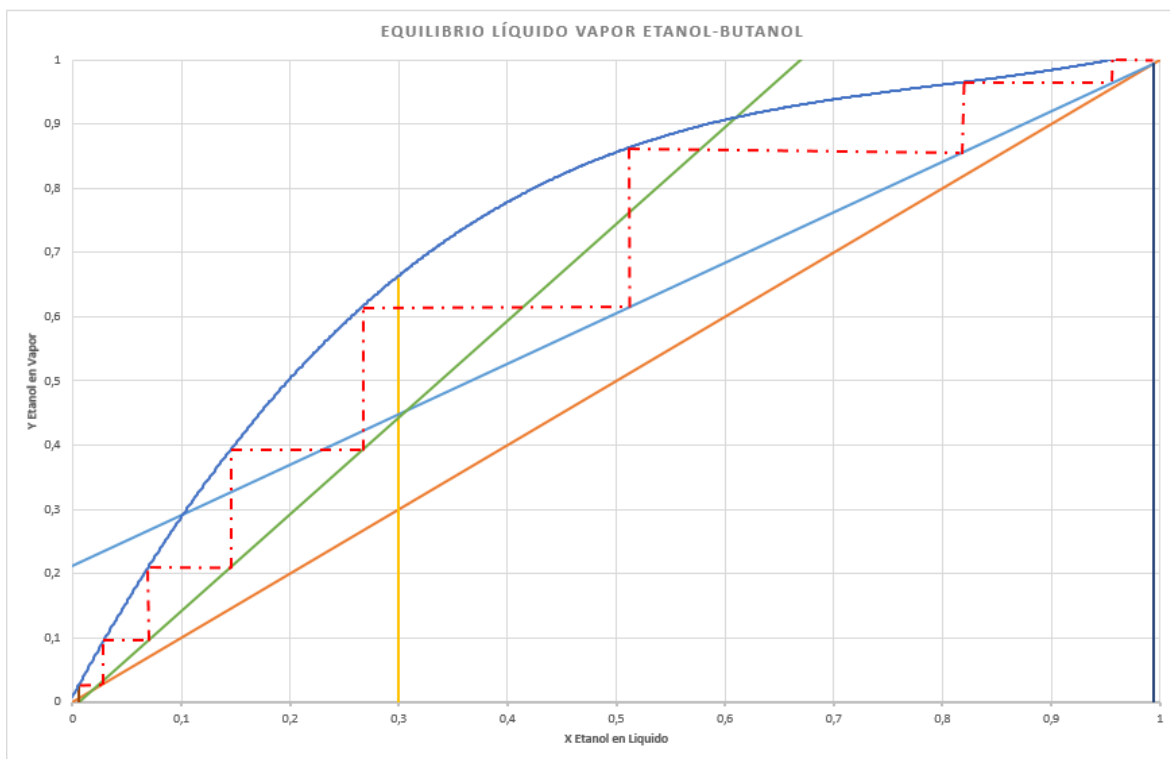


Ilustración 16: Método McCabe Thiele para torre 2

8.18 Carta Gantt

Tabla 26: Carta Gantt del Proceso

Equipo	Tiempo [horas]																							
	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80	85	90	95	100	105	110	115	120
Conminución																								
Difusor																								
IC																								
Hidrólisis																								
Filtro 1																								
R. Cultivo																								
Fermentación																								
Tamiz																								
Pervaporador																								
Condensador																								
Destilación 1																								
Destilación 2																								
Tiempo ciclo batch [h]																								110