

**DESARROLLO DE UN MODELO MILP PARA LA SINTESIS DE UNA RUTA DE
PROCESAMIENTO DE BIOETANOL A PARTIR DE BAGAZO DE CAÑA**

ROBERTO MIGUEL PINEDA PORTILLA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2014**

**DESARROLLO DE UN MODELO MILP PARA LA SINTESIS DE UNA RUTA DE
PROCESAMIENTO DE BIOETANOL A PARTIR DE BAGAZO DE CAÑA**

ROBERTO MIGUEL PINEDA PORTILLA

**Trabajo de grado presentado para optar al título de
Ingeniero Químico**

Director:

**Dr.Sc. Viatcheslav Kafarov
Profesor Titular Universidad Industrial de Santander**

Codirectora

MSc. Viviana Quintero Dallos

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA
2014**

Este trabajo está dedicado a mi papa y a mi hermano, quienes de las formas más distintas, inverosímiles y duras, hicieron a mi persona los aportes más difíciles de conjurar a persona alguna.

A mi mama, que estuvo ahí siempre para recibirlos, sufrirlos y gozarlos, conmigo.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, agradezco a mi familia, en cuya diversidad y trato encontré siempre apoyo y enriquecimiento. En segundo lugar a mis profesores, que a lo largo de toda mi historia académica me inclinaron, directa o indirectamente, a cuestionar y trabajar por el conocimiento disponible y por construir. En este sentido un agradecimiento especial a mi codirectora, ya que sin su confianza y trabajo, esta iniciativa no hubiera sido posible.

Por último, pero con énfasis, un agradecimiento a todas las personas que pude y puedo nombrar como amigos. Por darme tiempo e incentivo para ser como yo quería ser, por cuestionarme y soportarme, pero sobretodo, por esos momentos en los que tuve el honor y la fortuna de recibir alguno de sus francos pensamientos.

TABLA DE CONTENIDO

	pág
RESUMEN.....	10
ABSTRACT	11
1. INTRODUCCIÓN.....	12
2. MARCO CONCEPTUAL	13
2.1 Biomasa Lignocelulósica	13
2.2 Etapas del proceso para la obtención de Bioetanol Lignocelulósico	15
2.3 Síntesis de procesos por programación matemática.....	19
2.3.1 Modelos de Optimización	20
3. METODOLOGÍA	24
3.1 Esquema Metodológico	24
3.2 Descripción de la Metodología	24
3.2.1 Revisión Bibliográfica	24
3.2.2 Planteamiento de la Superestructura.....	25
3.2.3 Modelamiento matemático	26
3.2.3.1 Suposiciones y Simplificaciones	26
3.2.3.2 Función Objetivo	28
3.2.3.4 Restricciones de Balances	29
4. RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS	36
5. CONCLUSIONES	46
6. CITAS BIBLIOGRAFICAS	47
BIBLIOGRAFÍA.....	50
ANEXOS	53

LISTA DE FIGURAS

	pág
Figura 1. Estructura de una fibra de lignocelulosa	14
Figura 2. Estrategias de Integración en el Bioetanol lignocelulosico.	15
Figura 3. Esquema Metodológico	24
Figura 4. Superestructura Genérica	25
Figura 5. Diseño de la superestructura para bioetanol lignocelulósico	37
Figura 6. Ruta de procesamiento propuesta	41
Figura 7. Interacciones térmicas caso base	42
Figura 8. Interacciones Térmicas sub-optimo1	43
Figura 9. Interacciones Térmicas sub-optimo 2	44

LISTA DE ANEXOS

	pág
ANEXO A. Tabla de descripción de Pretratamientos.	53
ANEXO B. PARÁMETROS DE BLOQUES TECNOLÓGICOS	56
ANEXO C. Factor Límite de Conversión	57
ANEXO D. Factor Binario de existencia de reacciones, $B_{i,o,r}$	58
ANEXO E. Coeficientes de Separación, $Y_{i,e,o}$ y Coeficientes estequiométricos $Coef_e$	59
ANEXO F. Código modelo de optimización Lingo	60
ANEXO G. Convenciones e Índices de las Especies (compuestos) y las Reacciones	68
ANEXO H. Consideraciones y suposiciones del Caso en ejercicio	69
ANEXO I. Otras soluciones NO-Óptimas	71

RESUMEN

TITULO: DESARROLLO DE UN MODELO MILP PARA LA SINTESIS DE UNA RUTA DE PROCESAMIENTO DE BIOETANOL A PARTIR DE BAGAZO DE CAÑA *

AUTOR: ROBERTO MIGUEL PINEDA PORTILLA **

Palabras Clave: Screening, Biomasa Lignocelulósica, Síntesis de procesos, Programación Matemática, Balance de Energía.

La biomasa lignocelulósica es una importante fuente de energía alternativa particularmente para regiones del mundo que favorezcan la producción agrícola tanto por condiciones climatológicas, como por circunstancias socioeconómicas. Para desarrollar e implementar tecnologías de aprovechamiento de este recurso, y hacerlo de manera crítica, no solo es necesario contar con un fuerte brazo de investigación y desarrollo, también se requieren de estrategias y herramientas para una ágil y certera toma de decisiones sobre que iniciativas de investigación e inversión apoyar. En el presente trabajo se plantea robustecer la aproximación de Screening tecnológico, para combinar la practicidad de un modelo lineal con la estructuración de un diagrama de procesos industriales más tradicional, el cual usualmente da origen a modelos de mayor complejidad matemática. Mediante el establecimiento de una relación fija entre temperatura de operación y rendimiento se logró el planteamiento de un balance de energía que permite contemplar el impacto de los acondicionamientos térmicos entre tecnologías. Luego de concretado el enfoque metodológico y construido el modelo, se realizó un ejercicio de síntesis para la producción de etanol a partir de Bagazo de caña. A partir de los resultados obtenidos se pudo comprobar el impacto de las consideraciones energéticas en la valoración de las posibles rutas, aplicando una función objetivo de tipo económico; así como el potencial expansivo que tiene esta metodología hacia otras tecnologías emergentes, teniendo en cuenta la flexibilidad y las alternativas de diseño plasmadas en la superestructura.

* Trabajo de Grado

**Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Dr, Sc. Viatcheslav Kafarov. Codirector: MSc. Viviana Quintero Dallos.

ABSTRACT

TITLE: DEVELOPMENT OF A MILP MODEL FOR THE SYNTHESIS OF A PROCESSING ROUTE FOR BIOETHANOL FROM SUGAR CANE BAGASSE *

AUTHOR: ROBERTO MIGUEL PINEDA PORTILLA **

Keywords: Screening, Biomasa Lignocelulósica, Síntesis de procesos, Programación Matemática, Balance de Energía.

The lignocellulosic biomass is an important source of alternative energy particularly for those regions in the world where agriculture is one of the principal economic activities, whereas for weather or socioeconomic conditions. To develop and use of technologies that harness this resources in an optimal manner, it is necessary not only to have a strong R&D sector, but also strategies and tools to perform quick and accurate decisions regarding which paths to follow and invest in. In the present work a widening of a screening method is proposed. This is achieved combining the practicality of a lineal model with the structure of a traditional block flow diagram, which usually implies more mathematical complexity. By means of a fixed relation between operational temperature and yield, an energy balance was accomplished. This allows the model to evaluate the impact of thermal conditioning in between technological blocks. Once the Method was consolidated and the model finished, an example of its application was made, taking the case of the bioethanol from sugar cane bagasse. From the results obtained it was possible to probe the mentioned impact of the energetic considerations in the evaluation of each possible route, in this case applying an economical objective function. It was also possible to probe the potential application of these methods in other emerging technologies, given its flexibility and embodied design alternatives.

*Undergraduate final project.

** Physical-Chemical Engineering Faculty. Chemical Engineering School. Director: Dr, Sc. Viatcheslav Kafarov. Codirector: MSc. Viviana Quintero Dallos

1. INTRODUCCIÓN

El bioetanol es considerado como una solución a mediano plazo para la diversificación de la matriz energética mundial. Algunos datos sobre la producción de éste biocombustible revelan importantes tendencias de expansión y diversificación. En el año 2007, la producción mundial se estimó alrededor de 49 billones de litros y en el año 2011 aumento a 110 billones de litros, siendo Estados Unidos y Brasil, los mayores productores y consumidores [1]

En la actualidad, los esfuerzos tecnológicos se orientan a la utilización de biomasa lignocelulósica como materia prima para la obtención del bioetanol, soportado en su gran disponibilidad, bajo costo de materia prima, no competencia con la cadena alimentaria y altos rendimientos en su procesamiento. Los estudios están orientados principalmente a la utilización de residuos agrícolas de distinta composición, cuantificando una disponibilidad aproximada de 1623 Tg de la cual se puede obtener aproximadamente 491 billones de litros de bioetanol [2], cifra que es muy superior a la producción mundial que se reportó para el año 2012 (82567 millones de litros) [3].

Sin embargo, en la actualidad no existe una configuración industrial universalmente viable debido a la diversidad de características de la materia prima disponible en cada región y a los vacíos tecnológicos que surgen en las etapas del proceso para cada propuesta de ruta. De acuerdo a lo expuesto, se considera necesario aplicar el concepto de síntesis de procesos en la adopción de la ruta de procesamiento ya que esta herramienta permite la búsqueda de las soluciones óptimas.

Particularmente, Colombia se presenta como un país con gran potencial, para producir bioetanol a partir de biomasa lignocelulósica, teniendo en cuenta la variedad de cultivos agrícolas y por lo tanto diversidad de residuos, como: el

bagazo de caña (3.417.788 Ton/año), raquis de palma (403.102 Ton/año) y el rastrojo de maíz (677.171Ton/año), los cuales se caracterizan por sus altos rendimientos teóricos en la producción de bioetanol.[4] De acuerdo a lo expuesto, el presente trabajo de investigación, estuvo enfocado en el desarrollo de un modelo matemático lineal entero para la selección de una ruta de procesamiento para el bioetanol a partir de bagazo de caña, formulándolo como un problema de optimización. Esto teniendo en cuenta las mencionadas variadas características de las materias primas a disposición y el tipo de datos hasta ahora encontrados, las cuales propenden a un método flexible y versátil .

2. MARCO CONCEPTUAL

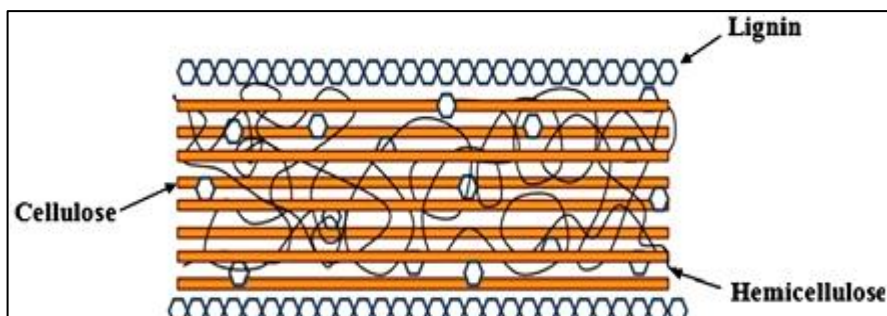
A nivel mundial el bioetanol ha adquirido un gran valor por la posibilidad de uso como combustible ya sea mezclado con gasolina o con petróleo, y sobre todo porque es una fuente renovable de energía. Su mezcla con este y otros productos anteriores proporciona un combustible de mejor calidad y más limpio. La producción de bioetanol se lleva a cabo por vía fermentativa utilizando diferentes fuentes de carbono como materias primas, que previa se transformación en azúcares fermentables, como fuentes de carbono para el correspondiente microorganismo. Dentro de estas materias primas los cuales se encuentra biomasa azucarada (Caña, remolacha etc), biomasa amilácea (maíz, trigo, mandioca etc.) y biomasa celulósica (residuos agrícolas, forestales etc.) [5]

En este trabajo de investigación se tomó como materia prima, la biomasa lignocelulósica debido a que representa una alternativa promisoría para ser utilizada como materia prima en la obtención de bioetanol debido a su gran disposición, bajo costo, no competencia con la cadena alimentaria y los altos rendimientos en el proceso [6]

2.1 Biomasa Lignocelulósica

Los materiales lignocelulósicos, incluyendo los productos de origen agrícola y forestal, están constituidos por tres polímeros estructurales (celulosa, hemicelulosa y lignina); y una serie de compuestos de bajo peso molecular solubles en agua (fracción hidrosoluble) o solventes orgánicos tal como se muestra en la figura 1.

Figura 1. Estructura de una fibra de lignocelulosa



Fuente: Mooda et al.[7]

La porción de carbohidratos contenidos dentro del material lignocelulósico está constituido por celulosa ($(C_6H_{10}O_5)_n$), identificado como uno de los polímeros más abundantes en la naturaleza, comprende del 10% al 20% del peso seco de las hojas, más o menos el 50% del peso de la madera y la corteza de los árboles y aproximadamente el 90% del peso de las fibras de algodón y hemicelulosa ($(C_5H_8O_4)_n$), un heteropolímero que contiene principalmente unidades anhidro azucaradas como pentosas (xilosa y arabinosa), hexosas (glucosa, manosa y galactosa) y ácidos urónicos, enlazados entre sí por enlaces glucosídicos, formando estructuras ramificadas en general amorfas [7].

La lignina ($C_9H_{10}O_2(OCH_3)_n$), es la macromolécula orgánica más abundante dentro de los materiales lignocelulósicos (Furlan, Bastos, de Castro, de Pelegrini, Resende, Gonçalves, de Campos, 2012). Esta sustancia, representa del 20 a 30% de la masa total de cualquier material lignocelulósico; se incorpora durante el crecimiento vegetal y básicamente está compuesta por unidades de fenilpropano que forman una macromolécula tridimensional y amorfa (Bailoni, et al 2006).

En este trabajo de investigación, se plantea utilizar el bagazo de caña como materia prima, el cual está constituido principalmente por celulosa (23-53%) hemicelulosa (20-35%) y lignina (10-25%); considerado como un residuo fibroso del tallo de la caña que queda después de triturar y extraer el jugo, el cual está

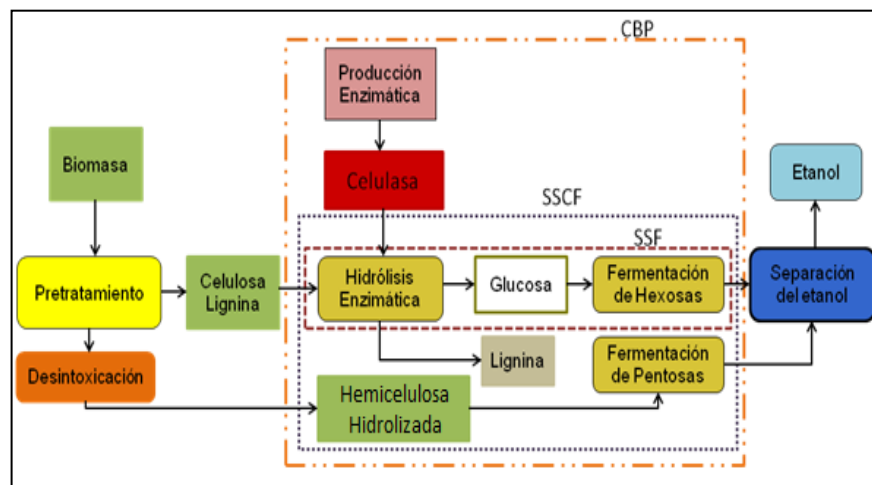
compuesto principalmente por fibras, agua y cantidades relativamente bajas de sólidos solubles, principalmente azúcar. Su composición varía según la variedad de caña, su madurez, el método de cosecha y finalmente de la eficiencia de la fábrica moledora

En Colombia se obtienen aproximadamente 31 toneladas de bagazo por 100 toneladas de caña procesada. La cantidad producida se encuentra repartida principalmente en los ingenios de la zona del valle geográfica del río Cauca [8].

2.2 Etapas del proceso para la obtención de Bioetanol Lignocelulósico

El proceso de producción de bioetanol de segunda generación se encuentra en proceso de maduración. No obstante, tal como se muestra en la figura 2, existe un esquema general del cual parten diversas investigaciones. De acuerdo con el esquema la ruta de procesamiento consta de cuatro etapas principales: pretratamiento, hidrólisis, fermentación y separación [9]

Figura 2. Estrategias de Integración en el Bioetanol lignocelulósico.



Fuente: Hamelinck et al. [9]

- **Pretratamiento**

Se identifica como una etapa previa en donde se adecua el sustrato para mejorar el rendimiento en las etapas siguientes del proceso. En materiales

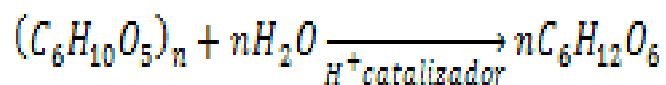
lignocelulosicos, la etapa de pretratamiento busca incrementar el área superficial para aumentar la reactividad de la enzima con la celulosa, reducir la cristalinidad, deslignificar parcialmente e hidrolizar las hemicelulosas, facilitando la formación de azúcares reductores por hidrólisis [10].

Esta etapa, es considerada como una de las más costosas, representando cerca del 25 % de la producción. Sin embargo, autores como Hamelinck *et al.*, 2005, muestran que esta etapa permite aumentar los rendimientos en la hidrólisis de celulosa de 20% a valores mayores a 90%.

En la actualidad se han establecido diferentes tecnologías para la etapa del pretratamiento, clasificadas en tres grupos básicamente: físicos, biológicos y químicos tal como se presenta en el Anexo A, sin embargo ninguno puede aplicar de forma genérica a las diferentes materias primas, lo que justifica un análisis detallado de cada tecnología. [11]

- **Hidrolisis**

La hidrólisis se define como el desdoblamiento de compuestos orgánicos, asociado al consumo de una o más moléculas de agua, con un rendimiento teórico de 1,11 g de glucosa/g de celulosa. La celulosa puede hidrolizarse empleando catalizadores químicos o enzimáticos y este proceso se representa mediante la siguiente reacción



El proceso de hidrólisis puede ser de tipo ácido o enzimático. En este trabajo, se seleccionó hidrólisis enzimática debido a las posibilidades de integración con las otras etapas del proceso

La hidrólisis enzimática de bagazo se usa principalmente para obtener polisacáridos como glucosa, xilosa y arabinosa utilizando enzimas de celulasa y

xylanasa. La dificultad de este procedimiento radica en el alto costo de las enzimas utilizadas. En la actualidad, se han realizado múltiples estudios sobre la elaboración de celulasa y xylanasa, sin lograr una reducción significativa en los costos de producción de estas enzimas [12]

- **Fermentación**

La fermentación alcohólica, se puede definir como una biorreacción que permite degradar azúcares en alcohol y dióxido de carbono. La levadura utilizada con mayor frecuencia para esta degradación es la *Saccharomyces cerevisiae* que convierte hexosas como la glucosa o la fructosa en alcohol etílico en condiciones anaeróbicas (metabolismo fermentativo).

Sin embargo, existen diversos estudios que comprueban la producción de alcohol por otros tipos de levaduras y algunas bacterias como *Zymomona mobilis*, utilizada en el caso de fermentar azúcares C₅. El rendimiento estequiométrico teórico para la transformación de glucosa en etanol es de 0.511 g de etanol y 0.489 g de dióxido de carbono por 1 gramo de glucosa, de esto se reporta haber alcanzado un 90 y 95% en rendimiento experimental sin embargo el rendimiento experimental es reportado en análisis de laboratorio entre el 90 y 95%. [10]

En los procesos SHF, se realiza una etapa de hidrólisis y una posterior fermentación. La ventaja de separar las etapas de hidrólisis y fermentación, es que ambas pueden realizarse a sus condiciones óptimas. La hidrólisis se realiza a la temperatura óptima de la enzima mientras que la fermentación a la temperatura óptima del microorganismo [14].

En los procesos de una etapa, la hidrólisis y la fermentación ocurren en el mismo reactor, reduciéndose la inhibición por producto final. Tiene un menor costo de inversión por ocurrir en un mismo equipo, pero posee la desventaja de necesitar diferentes condiciones óptimas de pH y temperatura, por lo que se requiere utilizar microorganismos termotolerantes. En este tipo de procesos, se han planteado algunas alternativas novedosas que permitirían el incremento de la velocidad de

hidrólisis y la consiguiente mejora en el rendimiento global de la producción de etanol.

- La conversión directa por el microorganismo (CDM), en la cual, el mismo organismo produce las enzimas y realiza la fermentación.

- La sacarificación y fermentación simultánea (SSF) en la cual se emplean celulasas junto con la presencia de un microorganismo productor de etanol. Entre las ventajas de este proceso, se incluye la mejora del rendimiento debido a la remoción de la lignina que inhibe al complejo enzimático de celulosa, sin embargo aún resta resolver algunas desventajas técnicas del método. La temperatura óptima de la SSF es alrededor de 38°C, la cual se encuentra en el rango de la temperatura óptima de la hidrólisis (45-50 °C) y la fermentación (30 °C) [15].

- **Separación y Deshidratación.**

"El principal problema de la producción de bioetanol anhidro es el alto costo energético que conlleva su separación, ya que durante la etapa de fermentación se obtienen grandes cantidades de caldo de fermentación con bajas concentraciones de alcohol (entre 5-12% en peso) por lo que es necesario eliminar el exceso de agua". La etapa de separación, o concentración, tiene entonces un aporte importante a las decisiones de diseño y una dinámica de intercambio de calor difícil de simplificación. [13]

En general antes de realizar la concentración significativa, a niveles anhidridos, se realiza una concentración previa y de menor complejidad que incrementa la concentración de entre el 5 y 10% en volumen dentro del caldo, hasta más del 90% en peso. Esta concentración se lleva a cabo mediante una Columnas de

concentración, que llegan aproximadamente a concentraciones de 50% en peso, seguidas de torres de rectificación.

- Destilación al vacío:

Opera bajo el principio de desplazamiento del punto azeotrópico haciendo descender la presión por debajo de 6kPa. Estas condiciones de operación hacen necesario un mayor diámetro de torre para manejar el mismo flujo másico, además de alto coste energético en el mantenimiento del vacío.

- Destilación Azeotrópica:

Implica la adición de otra componente para formar una mezcla ternaria para modificar la dinámica del equilibrio líquido-Vapor, y facilitar la separación. Para esto es necesario además de la adición del compuesto extra (en este caso Benceno) y la construcción de 1 o más columnas extras.

- Destilación Extractiva:

De implicaciones de similares a la Azeotrópica, las diferencias estriban en el carácter del compuesto a adicionar. En el caso extractivo un compuesto más afín al agua se adiciona con el objeto de arrastrar la misma y concentrar el etanol. Esto no implica la modificación de la dinámica binaria de la mezcla, solo un sustituyente, pero sí que este debe presentar una baja volatilidad para facilitar su posterior separación [13].

En la búsqueda de rutas tecnológicas más eficientes, se han implementado diversas estrategias que involucran integración de etapas de tipo reacción-reacción y reacción separación; logrando mejores condiciones de operación, mayor eficiencia, y menor consumo energético. Estas configuraciones, también se pueden identificar en la figura 2 y el Anexo 1.

2.3 Síntesis de procesos por programación matemática

La síntesis de procesos por programación matemática consiste en la aplicación de algoritmos de optimización a modelos de mayor o menor complejidad,

dependiendo de las características de los fenómenos modelados y de las necesidades del ejercicio de síntesis, que pueden representar desde tuberías y equipos hasta configuraciones enteras de las plantas **[16]**.

Este enfoque ofrece una mayor versatilidad, adaptabilidad y agilidad en la tarea de optar por una u otra opción de diseño frente a la metodología jerárquico-heurística que expone Douglas la cual ofrece un rango de aplicación sumamente extenso y en general resultados efectivos en la generación de propuestas de configuración cercanas al óptimo.

Sin embargo, no responde bien ante operaciones mixtas y/o procesos cuyas etapas muestren características difícilmente clasificables dentro de los pasos de su aplicación, dada la experiencia necesaria para la misma y la no consideración de interacciones entre los diferentes niveles de síntesis **[20]**.

2.3.1 Modelos de Optimización

En todo problema de optimización se pueden identificar tres elementos principales: las restricciones de igualdad o desigualdad, el algoritmo de optimización y la función objetivo.

- *Restricciones de igualdad o desigualdad*

En un ejercicio de síntesis formal, el conjunto de restricciones lo componen básicamente los balances de masa y energía de las corrientes y los equipos, así como las leyes termodinámicas y demás limitaciones fenomenológicas propias a los procesos tenidos en cuenta. **[18]**

No es común ver un modelo (o conjunto de restricciones) que maneje todas, o casi todas estas consideraciones a la vez y al mismo nivel, debido a que implicaría una complejidad impráctica a la hora de aplicar el algoritmo.

- *Algoritmo de Optimización*

Un algoritmo de optimización, puede definir como una herramienta utilizada para reducir el tiempo de cómputo e incrementar la certeza de optimalidad en un proceso de prueba y error aplicando ciertos métodos numéricos [20].

Los algoritmos se pueden clasificar en *determinísticos* y *estocásticos*. En este trabajo de investigación se trabajaron los algoritmos determinísticos, los cuales basan su funcionamiento en la estructura interna del modelo y la función objetivo [19].

- *Función Objetivo*

La función objetivo es en definitiva el elemento de mayor peso a la hora de realizar la selección, porque es en ella en la que se deben dejar explícitos los criterios que se van a usar, es ella también la que debe sacar provecho al enfoque de modelado y en ella se debe ejercer el juicio correcto para parametrizar correctamente las variables de decisión, las cuales en general no tendrán las mismas unidades.

Dentro de la literatura se enuncian muchos tipos de modelos para el diseño y síntesis de procesos, dependiendo como se dijo anteriormente del nivel de detalle. A continuación se enuncian los modelos que fueron base en el desarrollo de éste trabajo de investigación [20].

- *Agregados*

Con alto grado de simplificación, la cual obedece al aspecto en particular a ser optimizado. Aquí se encuentran modelos como los usados para minimizar los costos de servicios industriales en destilación, o hallar el número mínimo de unidades en redes de intercambio de calor.

- *Rigurosos*

Son altamente detallados, centrándose en los modelos disponibles para predecir el desempeño de las unidades de operación. Son usados, por ejemplo, en la síntesis de secuencias de destilación, tanto ideal como no-ideal, reflejando los desafíos que plantea la linealización de este tipo de procesos.

- Tipo “short Cut”:

Su grado de detalle se sitúa entre los dos anteriores, y los procesos de transformación son predichos aprovechando al máximo la forma algebraica de las ecuaciones a disposición. Ejemplos son los que involucran optimización por costos, y suelen suponer problemas de tipo MILP (de programación mixta lineal entera, por sus siglas en inglés) o LP (de programación lineal).

Además del tipo de problema de optimización al que se aspira llegar, la formulación del modelo también debe apuntar a la estrategia de solución que se desea implementar. Existen dos estrategias, que se enuncian a continuación:

- *Secuencial*

Consiste en la partición del problema en una serie de subproblemas, que serán resueltos de manera secuencial, y cuyo orden generalmente obedece a un sentido de menor a mayor complejidad. Esta estrategia se asemeja más a la metodología jerárquica-heurística propuesta por Douglas.

- *Simultanea*

Implica que todas las restricciones son tomadas en cuenta simultáneamente al momento de asignar valores para las variables, es decir, el modelo se optimiza de una vez. Es una forma bastante rigurosa que puede presentar dificultades dependiendo de la complejidad del modelo [20].

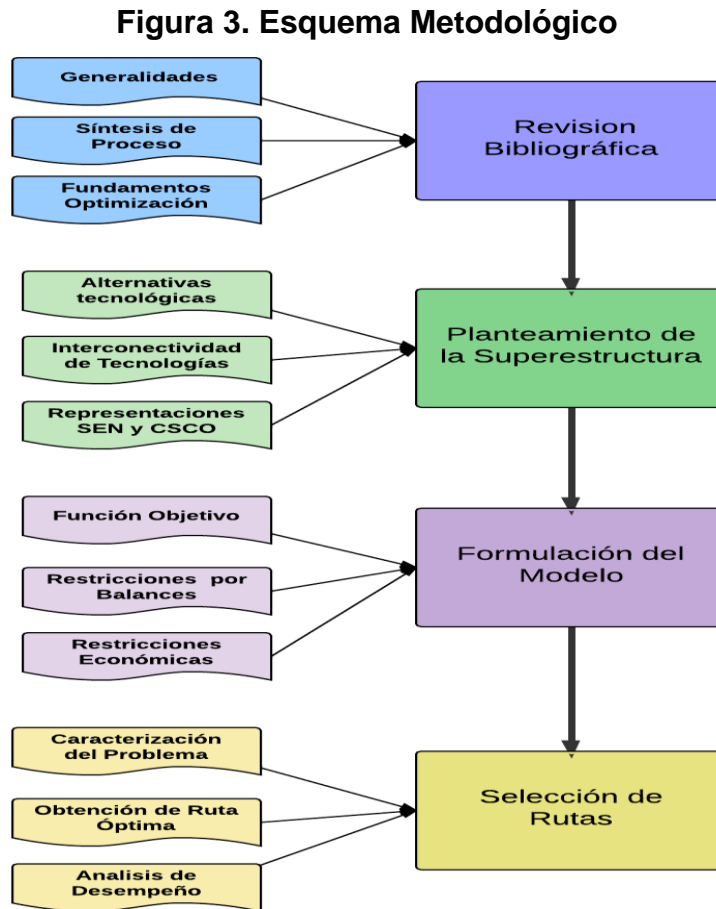
Actualmente, el ejercicio de síntesis de procesos por programación matemática, es utilizado en múltiples casos ingenieriles tales como el diseño conceptual de biorefinerías, una forma bastante simplificada para los modelos (rendimientos

experimentales aplicados algebraicamente, reacciones estequiométricas en principio, etc.) y centra su atención en la evaluación de costos; en lo que se podrían denominar tipo “short cut” [26].

En un ejemplo más cercano aún de aplicación de la síntesis por programación en el campo de los biocombustibles, son los estudios desarrollado por Cardona et al. [21][27] en los cuales, entre muchas propuestas, se hace una aproximación detallada (incluso en cuanto al metabolismo microbiano) de los fenómenos que tienen lugar en el proceso de obtención del alcohol, tanto a partir del bagazo como del jugo de la caña. Para ello hacen uso de un software especializado en la síntesis por programación matemática acoplado en algunos casos a otros programas para manejar la complejidad de los modelos de cinética microbiana entre otros [23].

3. METODOLOGÍA

3.1 Esquema Metodológico



Fuente: Autor

3.2 Descripción de la Metodología

3.2.1 Revisión Bibliográfica

En esta primera etapa, se realizó una búsqueda bibliográfica enfocada principalmente en tecnologías para la obtención de bioetanol lignocelulósico, fundamento teórico de optimización, publicaciones referentes a la síntesis de

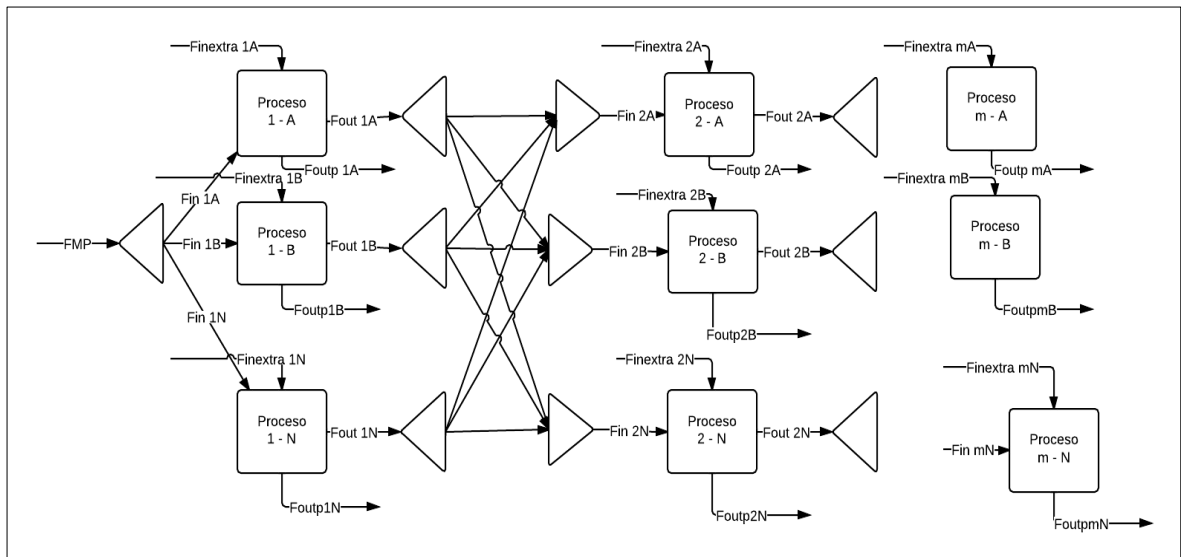
procesos desde la programación, desarrollos y aplicaciones de la síntesis de rutas tecnológicas para biorefinerías

Por otro lado se realizó la capacitación con el software de optimización LINGO 14.0, el cual hace parte del paquete de productos de Lindo Systems Inc, caracterizado por ofrecer un ambiente flexible de modelado.

3.2.2 Planteamiento de la Superestructura

Una vez definida la materia prima e identificadas las alternativas tecnológicas en cada etapa del proceso, con sus respectivas condiciones de operación y rendimiento (*Anexo B*), se inicia el ejercicio de síntesis de procesos con el planteamiento de la superestructura.

Figura 4. Superestructura Genérica



Fuente: Autor

La construcción de este diagrama se fundamentó en la representación tipo CSCO (Especies Químicas y Operadores Conversores, por sus siglas en inglés) de modelo tipo “short cut”, pero buscando enriquecerlo con elementos de una SEN (Red de Equipos y Estados, por sus siglas en inglés) o STN (Red de Estados y Tareas, por sus siglas en inglés) de modelo más riguroso. Establecida la naturaleza de la superestructura y las opciones a representar se especificaron las

relaciones de los bloques tecnológicos es decir la interacción entre las alternativas tal como se muestra en la figura 4.

3.2.3 Modelamiento matemático

El modelo matemático, se desarrolló en congruencia con la superestructura, y se planteó a partir de balances de masa y energía. En general los objetivos de su desarrollo fueron:

- Incluir consideraciones térmicas.
- Embeber la lógica física general del proceso.
- Mantener una simplicidad que justifique las suposiciones hechas ofreciendo resultados concluyentes a bajo costo computacional (mantener la linealidad).
- Constituirse en una herramienta práctica para el proceso de diseño, de acuerdo al tipo de datos a disposición.

3.2.3.1 Suposiciones y Simplificaciones

Una vez definidos los objetivos, fue necesario hacer una serie de simplificaciones y suposiciones, explícitas a continuación:

- La cinética no fue tomada en cuenta, en vista de su inherente naturaleza no-lineal, Tampoco la descripción de cualquier equilibrio de fases. Se asume que dichos fenómenos son tenidos en cuenta indirectamente a través de los datos de operación y costos de cada bloque tecnológico.
- El balance de energía, aunque formulado de manera convencional en su forma, tuvo que ser acondicionado en su resolución dada la necesidad de mantener el modelo lineal. Así, la temperatura de cada bloque, que determina su calor de salida, está condicionada, respondiendo a lo reportado en la literatura como condiciones adecuadas para los rendimientos usados en cada transformación.

- Las propiedades termodinámicas, así como las fases, usadas para cada compuesto fueron las pertinentes para el caso específico a tratar (bioetanol a partir de bagazo), y sus valores los reportados en trabajos que lidiaron con los compuestos de interés en las condiciones de operación de las tecnologías en cuestión [22].
- Para el modelo en general solo se tienen en cuenta los compuestos clave que se seleccionaron de la materia prima y otros reactivos particulares de ser necesarios (reaccionar con los compuestos clave). Aquellas fracciones de otros compuestos que se incluyeran para modificar condiciones de operación no son tenidas en cuenta; el costo de las relevantes (enzimas, etc.) fue incluido como insumo. Lo mismo aplica para reacciones secundarias.
- No se calculan de manera explícita reflujos, por cuanto aportaría considerable complejidad sin compensación equivalente en la evaluación. (Una mejora interna no se descartaría para un trabajo posterior).
- La estimación de costos se realizó teniendo en cuenta los parámetros de operación y de rendimiento de cada tecnología, con su respectivo costo de referencia para un flujo o capacidad dado. Se usó una relación de proporcionalidad directa para calcular el costo real de acuerdo a los parámetros de entrada (particularmente el flujo de materia prima), pero se dejó la opción de modificar el exponente de esta relación para asemejar su cálculo al de una estimación de costo de maquinaria ordinaria. Por supuesto el uso de exponentes diferentes a la unidad implicará la pérdida de linealidad de todo el modelo.

- Los efectos de la presión no fueron tenidos en cuenta en el balance de energía, considerando que aunque se lidiará con variaciones de presión importantes, tienen mayor peso, tanto en evaluaciones ambientales como económicas, los fenómenos netamente térmicos para este primer ejercicio.

3.2.3.2 Función Objetivo

Como se puede observar en la función objetivo general, se trata de una función de tipo económico, en la que se busca plasmar un flujo de caja sencillo en el periodo de un año.

$$\begin{aligned} \frac{\text{Utilidad}}{\text{año}} = & \left\{ \left(\sum_0^o Mf_{out_{I,\#},0} * PM_{\#} \right) * Precio_{\#} - \sum_i^I \sum_0^o (Fin_{i,o} + Finex_{i,o}) * Cop_{i,o} \right. \\ & - \sum_i^I \sum_0^o \sum_e^E (Mfinex_{i,e,o} * PM_e * Precio_e) - \sum_i^I \sum_0^o (Qenf_{i,o} * Cenf + Qcal_{i,o} * Ccal) \\ & \left. - Fmp * Precio_{mp} \right\} * \left(\frac{\text{Horas}}{\text{Año}} \right) - \left\{ \sum_i^I \sum_0^o (N_{i,o} * Cfix_{i,o}) \right\} * \frac{1}{\text{Años Diferir}} \end{aligned}$$

(Función Objetivo General)

Se toma la corriente másica del compuesto de interés (#) en la última capa (I) y se multiplica por su precio (determinado de acuerdo al valor comercial en el tiempo de evaluación), a esto se le sustrae:

1. El costo operacional dado por un parámetro propio a cada bloque tecnológico y proporcional al flujo total de entrada al bloque.
2. El costo de cualquier corriente extra que se agregue en algún bloque a lo largo del proceso.
3. El costo estimado de consumo de servicios industriales.
4. El costo de la materia prima.
5. La inversión inicial de la maquinaria principal, dividida en el número de años a amortizar. (proporción con los equipos de referencia multiplicada por el costo de referencia)

Es evidente que el concepto de devaluación, valorización e interés entre otros no es tenido en cuenta aquí, principalmente con el objeto de mantener la simplicidad del planteamiento general, pero también en vista de la incerteza en la que se incurre al proyectar el comportamiento de estos parámetros en tecnologías en pleno desarrollo. Por la misma razón no se incluyen dinámicas de mercado.

3.2.3.4 Restricciones de Balances

La ventaja inicial del planteamiento de las restricciones de balance en el programa fue el hecho de la posibilidad de definir Sets, o categorías, de variables. Haciendo esto era posible indexar dichas variables (eg: especie₁ = Hemicelulosa), de manera tal que restricciones de una forma dada se aplicaran a todas las variables de un tipo determinado, como los balances de masa y energía, realizándose de manera automática por un número deseado de veces.

Esto no solo facilitó los cálculos, sino posibilitó la generalización del ejercicio a diferentes condiciones iniciales y posibilitará en el futuro la aplicación extendida de esta forma de restricciones a un número arbitrario de bloques, capas y compuestos, siempre y cuando se cuenten con los datos. Esto va de la mano con el enlace entre Lingo y Excel, que permite una interacción más amigable en la introducción de datos, y recolección de resultados.

a. Balance de Masa

La *ecuación 1*, representa un balance molar en estado estacionario, la nomenclatura hasta ahora usada, se especifica en el Anexo G y H. En esta ecuación, y en otras siguientes veremos ciertos términos desglosados como respuesta a la búsqueda de un más fácil manejo de las variables a la hora de incluirlas en la función objetivo (variables de decisión) o como herramienta matemática para mantener la simplicidad del modelo.

$$\forall i, o, e \quad Mfin_{i,e,o} + Mfinex_{i,e,o} - Mfout_{i,e,o} - Mfoutp_{i,e,o} + Mfrxn_{i,e,o} = 0 \quad (1)$$

La *ecuación 2*, describe el término de reacción propuesto en la ecuación 1. La formulación usando el concepto de coordenada de reacción se usó puesto que ofrecía la facilidad de relacionar las cantidades reaccionantes de los diferentes compuestos de manera indirecta. La inclusión del factor binario de existencia de Reacción (B), permitió controlar directamente la presencia o no de una reacción en determinado bloque tecnológico.

$$\forall i, o, e \quad Mfrxn_{i,e,o} = \sum_r^R X_{i,o,r} * Coef_{r,e} * B_{i,o,r} \quad (2)$$

Las *ecuaciones 3 y 4* constituyen la composición de las diferentes corrientes másicas de entrada y salida a cada bloque. De manera análoga se definieron para “Foutp” y “Finex”.

$$\forall i, o \quad Fin_{i,o} = \sum_e^E Mfin_{i,e,o} * PM_e \quad (3)$$

$$\forall i, o \quad Foutp_{i,o} = \sum_e^E Mfoutp_{i,e,o} * PM_e \quad (4)$$

La *ecuación 5*, define la interacción másica entre las diferentes capas de transformación, de manera que se conserven los flujos másicos “Mfout” de la capa anterior.

$$\forall i \geq 1, e \quad \sum_o^O Mfin_{i,e,o} = \sum_o^O Mfout_{i-1,e,o} \quad (5)$$

Para la capa inicial es necesario plantear un balance específico, independiente del número de capas que se deseen incluir. Este balance depende de la composición de materia prima y de su flujo.

$$\forall o, e \quad \sum_o^O Mfin_{1,e,o} = (Fmp * Cmp_e) / PM_e \quad (6)$$

Las *ecuaciones 7 y 8*, muestran la aplicación del coeficiente de separación (Y), el cual básicamente busca especificar que fracción del flujo (másico o molar) que

sale del balance (MfoutTot), en efecto continua en la línea de transformaciones de interés (Mfout), y cual se pierde o desvía (Mfoutp).

$$\forall i, o, e \quad Mfout_{i,e,o} + Mfoutp_{i,e,o} = MfoutTot_{i,e,o} \quad (7)$$

$$\forall i, o, e \quad Mfout_{i,e,o} = MfoutTot_{i,e,o} * Y_{i,e,o} \quad (8)$$

La *inecuación 9* introduce el factor limitante de conversión, el cual simula la ineficiencia de reacción de cada bloque. Nótese que siguiendo con la consideración hecha con la coordenada de reacción, la limitación en la conversión es un límite superior, luego si se obtuviera más beneficio económico convirtiendo menos reactivo, la variable estaría libre para tomar un valor menor.

$$\forall i, o, e \quad MfoutTot_{i,e,o} \geq (Mfin_{i,e,o} + Mfinex_{i,e,o}) * Lim_{i,e,o} \quad (9)$$

b. Balance de Energía

La convención seguida en el planteamiento de este balance sigue la percepción intuitiva de entrada y salida del sistema. El calor que se sustrae al sistema, como en una reacción endotérmica o la refrigeración, se considera negativo; mientras que el que se libera en el sistema, como en el calentamiento o una reacción exotérmica, se le da signo positivo. Todas las variables son tomadas positivas por defecto por Lingo, a menos que el programador especifique lo contrario. Los términos de calor de refrigeración y de calentamiento atienden a este hecho, por cuanto sus signos corresponden con el retiro o adición de calor, respectivamente. Igual sucede con el calor de las corrientes extras, que vienen a temperatura ambiente puesto que cualquier precalentamiento de las mismas hace parte del gasto de acondicionamiento energético que precisamente busca ser tomado en cuenta en este planteamiento.

$$\forall i, o \quad Qe_{i,o} - Qs_{i,o} - Qr_{i,o} - Qref_{i,o} + Qcal_{i,o} + Qex_{i,o} = 0 \quad (10)$$

Las ecuaciones 11 y 12 describen la forma que se adoptó para estimar las entalpías, o calores para el caso, de salida y entrada extra. La temperatura del bloque, $T_{i,o}$, depende del bloque seleccionado; y la T_{ref} está definida para toda la evaluación del modelo como la temperatura estándar y es vital que así sea ya que permite el uso de las entalpías de formación estándar en el calor de reacción.

$$\forall i, o \quad Qs_{i,o} = \left(\sum_e^E Mfout_{i,e,o} \right) * \int_{T_{ref}}^{T_{i,o}} Cp_e * dT \quad (11)$$

$$\forall i, o \quad Qex_{i,o} = \left(\sum_e^E Mfinex_{i,e,o} \right) * \int_{T_{ref}}^{T_{ext}} Cp_e * dT \quad (12)$$

En la ecuación 13 se definió, el término de calor de reacción, haciendo uso como ya se dijo de la entalpia de formación estándar de productos y reactivos, multiplicada por sus respectivos coeficientes estequiométricos en cada reacción. Nuevamente se hace uso de las variables de coordenada de reacción y presencia de la misma en el bloque.

$$\forall i, o \quad Qr_{i,o} = \sum_r^R \left(X_{i,o,r} * B_{i,o,r} * \left(\sum_e^E Coef_{r,e} * h_e^0 \right) \right) \quad (13)$$

Se presenta la interacción energética entre operadores de diferente capa de transformación, exceptuando como en el caso másico, la capa inicial.

$$\forall i \geq 1, o \quad \sum_o^O Qe_{i,o} = \sum_o^O Qs_{i-1,o} \quad (14)$$

Para la capa inicial, Ec. 15, se plantea un balance particular, apoyándose en los flujos molares calculados en el caso másico, e introduciendo en el cálculo la temperatura de la materia prima como nueva variable.

$$\forall o \quad Qe_{1,o} = \left(\sum_e^E Mfin_{1,e,o} \right) * \int_{T_{ref}}^{T_{mp}} Cp_e * dT \quad (15)$$

La ecuación 16, es la forma en que se determina el valor de Cp para cada especie haciendo uso de un polinomio genérico con constantes específicas para cada especie. El uso de un Cp variable responde a la intención de acercar el modelo a

conceptos termodinámicos básicos hecho de usar un polinomio para Cp es un intento por acercarse a la realidad térmica del proceso, sin embargo usar el mismo polinomio y coeficientes para las diferentes condiciones de operación es una aproximación, sustentada en la fuente de estos datos (tanto forma como coeficientes del polinomio). [22]

$$Cp_e = A + B * T + C * T^2 + D * T^3 \quad (16)$$

c. Restricciones Físicas Lógicas

Estas son las que permiten al modelo matemático obedecer asunciones inherentes que hacemos al plantear un balance, pero que la meticulosidad matemática demanda dejar explícito. Por ejemplo la no entrada de un flujo de energía a un bloque al que entra un valor numérico residual de flujo másico, producto de la tolerancia propia de la herramienta y opciones computacionales usadas. y especialmente al algoritmo que trabajará sobre este, acoplarse a la realidad física que no está implícita en las formulaciones matemáticas anteriores.

Las ecuaciones 17 y 18 restringen la asignación de servicios industriales a bloques tecnológicos en los que no entra un flujo másico de operación. Tanto la variable BigM de masa como la de energía, no son otra cosa que coeficientes suficientemente grandes para que, dado el caso de la existencia del bloque ($Ex_{i,o} = 1$), no se limite el flujo real que se calcula a partir de otras restricciones. Caso contrario de no existir el bloque ($Ex_{i,o} = 0$).

$$\forall i, o \quad Qref_{i,o} \leq BigM_{energía} * Ex_{i,o} \quad (17)$$

$$\forall i, o \quad Qcal_{i,o} \leq BigM_{energía} * Ex_{i,o} \quad (18)$$

Las ecuaciones 19 y 20 cumplen la función de no permitir la entrada de flujo másico a los bloques no seleccionados, análogamente a las dos ecuaciones anteriores.

$$\forall i, o \quad Fin_{i,o} \leq BigM_{masa} * Ex_{i,o} \quad (19)$$

$$\forall i, o \quad Finex_{i,o} \leq BigM_{masa} * Ex_{i,o} \quad (20)$$

La función de la ecuación 21 es la de no permitir la existencia de no más de un bloque tecnológico por capa de transformación, es decir es la restricción de exclusión.

$$\forall i \quad \sum_o Ex_{i,o} = 1 \quad (21)$$

d. Restricciones Económicas

Estas restricciones sirven para estimar los costos fijos de los equipos principales comprendidos dentro de cada bloque de transformación tecnológica, a partir de una relación simple con otro(s) equipo(s) del cual ya se conozcan valores. Esta es una relación simplificada, y obviamente no va a detallar de manera precisa los costos de implementación e instalación, pero dependiendo de los valores que se introduzcan, si puede llegar a ser una forma útil de predicción de costos.

El exponente A, mencionado antes en este trabajo, es de gran importancia dado que se requiere su ingreso al usuario como dato a alimentar. Para el mantenimiento de la linealidad del modelo se requiere de la unidad como valor fijo, pero conociendo que la relación de costos rara vez se expresa de forma lineal, este valor está abierto a cambios. Se sugiere por ejemplo, una corrida inicial con un exponente igual a 1, y una posterior con un valor típico de la literatura, como 0.75 más verosímil; teniendo presente para la convergencia, el valor óptimo de la corrida anterior.

- *Por Flujos Másicos*

En primer momento, como vemos en la ecuación 22, se puede hacer uso de una relación típica entra capacidades instaladas totales de los bloques como flujos másicos.

$$\forall i, o \quad N_{i,o} = \left[\frac{(Fin_{i,o} + Finex_{i,o})}{Capacidad_{i,o}} \right]^A \quad (22)$$

- *Por tiempos de residencia y Capacidades Volumétricas*

Teniendo en cuenta la naturaleza fuertemente discontinua de algunos bloques, así como la importancia de los tiempos de residencia para algunas transformaciones, se propone otra relación que tenga en cuenta estos valores y una capacidad volumétrica de referencia. En este caso es de cuidado la consecución de los datos necesarios y la estimación de la densidad promedio del flujo de entrada.

$$\forall i, o \quad N_{i,o} = \left[\frac{(Fin_{i,o} + Finex_{i,o}) * tres_{i,o}}{Capacidad_{i,o} * Densidad\ Estimada_{i,o}} \right]^A \quad (23)$$

En ambos casos, ecuaciones 22 y 23, se busca un valor adimensional (N) para multiplicar el costo de referencia “CFix” en la función Objetivo.

e. Restricciones propias del caso

Así como estas restricciones generales, será necesaria para la implementación del modelo en casos particulares la inclusión de restricciones adicionales que describan las características de las opciones tecnológicas a modelar más adecuadamente las configuraciones a modelar. Por ejemplo más de un bloque habilitado para alguna capa, o la desviación de un flujo usando las corrientes de perdida “Foutp” y extras “Finex”; ambos casos se dieron para el caso del etanol a

partir de bagazo de caña. Estos se especificarán en la caracterización del caso de ser relevantes.

4. RESULTADOS Y ANALISIS DE RESULTADOS

1. Selección de las alternativas tecnológicas en cada etapa del proceso

Para el proceso de obtención de bioetanol lignocelulósico se encuentra diversas tecnologías en cada una de las etapas de procesamiento, tal como se muestra en el anexo 1. En este trabajo, se realizó un primer “screening teniendo en cuenta las características de la materia prima escogida (bagazo de caña), la madurez tecnológica y la consistencia de los datos encontrados.

En la tabla 1, se presentan las alternativas objeto de estudio en este trabajo.

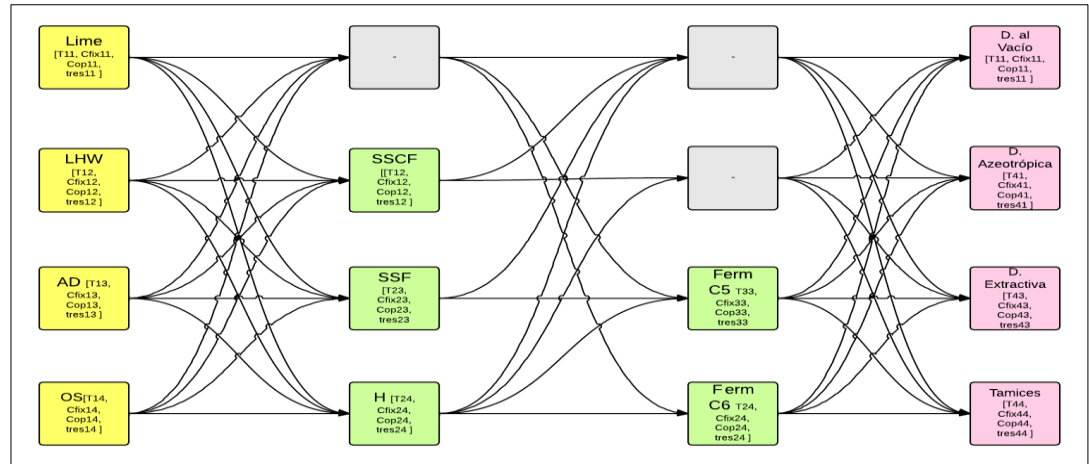
Tabla 1. Tecnologías en las etapas del proceso

CAPAS	OPERADORES			
	1	2	3	4
Pretratamientos	Lime	LHW	Acido Diluido	Organosolv
Hidrólisis Principal	Hidrolisis (SHF)	SSF	SSCF	-
Fermentaciones	Fermentación (C ₆)	Fermentación (C ₅)	-	-
Separación	Destilación al Vacío	Destilación Azeotrópica	Destilación Extractiva	Tamices Moleculares

Fuente: Autor

Los parámetros requeridos para el caso particular de aplicación, se muestran en la. Algunos de los parámetros necesarios para cada bloque aparecen en la superestructura propuesta, en la siguiente figura:

Figura 5. Diseño de la superestructura para bioetanol lignocelulósico



Fuente: Autor

2. Particularización de la Superestructura :

Algunas consideraciones y ajustes de programación, referentes a la naturaleza de los procesos a tener en cuenta se refieren a continuación (el resto se puede consultar en el código, ver *Anexo F*):

$$\sum_0^0 Ex_{3,0} \leq 2 \quad (24)$$

La inecuación 24, es una excepción a la restricción de selección que se lleva a cabo en la capa 3 puesto que debe darse campo para la realización de las dos fermentaciones por separado.

$$Ex_{2,2} + Ex_{3,1} \leq 1 \quad (25)$$

$$Ex_{2,3} + Ex_{3,1} + Ex_{3,2} \leq 1 \quad (26)$$

$$Ex_{3,1} + Ex_{3,3} + Ex_{3,4} \leq 1 \quad (27)$$

$$Ex_{3,2} + Ex_{3,3} + Ex_{3,4} \leq 1 \quad (28)$$

Las inecuaciones 25 a 28, impiden la existencia de múltiples equipos para la misma transformación. La primera, por ejemplo, no permite que se realice un proceso SSF y luego se envíe flujo a una “segunda” fermentación de hexosas. Los Bloques (3,3) y (3,4), así como el (2,4), son bloques vacíos; es decir en ellos no se lleva a cabo transformación alguna ni generan costo alguno. Puede decirse que las ecuaciones 25, 27 y 28 sirven para que pueda llevarse a cabo la fermentación de Pentosas y Hexosas por separado en la misma configuración, sin que se usen los bloques vacíos.

$$\forall e \quad \sum_o Mfout_{1,e,o} = Mfout_{3,e,2} + Mfout_{2,e,3} + Mfin_{2,e,4} \quad (29)$$

La ecuación 29 deja explícitamente vinculada la corriente de pérdida de cualquiera de los bloques de la capa 1, corriente que se considera de lo solubilizado en dicha capa inicial, y que por ende es relativamente rica en pentosas, con los bloques en que se da la fermentación de estas a etanol, tanto en la capa dos como la tres.

$$X_{1,o,6} = ((Fmp * Cmp_e) / PM_e) * (1 - lim_{i,2,o}) * Ex_{1,o} \quad (30)$$

La ecuación 30 permite fijar una conversión en la primera capa, esto debido a que el algoritmo asigna un valor de cero a esta variable al ejecutarse en respuesta a la pérdida de celulosa disponible para hidrolizar, y posteriormente llevar a etanol.

La función objetivo específica para el caso del Etanol a partir de bagazo de caña, la cual es una versión modificada de la forma genérica descarta en la metodología adaptada a las consideraciones particulares del caso, es:

$$\frac{\text{Utilidad}}{\text{año}} = \left\{ \left(\sum_o^4 Mf_{out_{4,6,0}} * PM_6 \right) * Precio_6 - \sum_i^4 \sum_o^4 (Fin_{i,o} + Finex_{i,o}) * Cop_{i,o} \right. \\ \left. - \sum_i^4 \sum_o^4 (Mfinex_{i,7,0} * PM_7 * Precio_7) \right. \\ \left. - \sum_i^4 \sum_o^4 (Qenf_{i,o} * Cen_f + Qcal_{i,o} * Ccal) - Fmp * Precio_{mp} \right\} \\ * (8000) - \left\{ \sum_i^4 \sum_o^4 (N_{i,o} * Cfix_{i,o}) \right\} * \frac{1}{5}$$

(Función Objetivo Particularizada)

Aquí se ve que no se cobraron todas las corrientes extras, en vista de que si se introduce una corriente ya tratada en el mismo proceso, la misma debe acarrear gastos como los de un reactor fresco siendo alimentado. También se han particularizado las dimensiones reales de la superestructura (4*4), y se han hecho manifiestos los años en los que se plantea dividir periodos a diferir el pago de la inversión inicial y las horas por año tenidas en cuenta.

Suposiciones particulares para este caso:

- Temperatura fija de la destilación: Dada la complejidad de la dinámica térmica de una destilación se optó por tomar una temperatura cercana a los 100 grados Centígrados para los 4 Bloques de esta capa. El gasto de rehervidores y condensadores se asume de los costos operativos de cada bloque. La temperatura se toma como la del flujo de entrada a la configuración de separación, luego de pasar por un precalentador o intercambiador el cual se observa en todas las configuraciones.
- Pseudoreacción de pretratamiento: Con objeto de simular de alguna manera la transformación estructural necesaria que sufre la materia prima durante el pretratamiento, se optó por la introducción de dos procesos

simulados análogamente a una reacción, con sus correspondientes especies resultantes (hemicelulosa y celulosa pretratadas) las cuales no presentarán cambio en entalpia de formación o peso molecular pero sí en sus coeficientes de separación, a manera de coeficiente de licuefacción, y coeficientes estequiométricos (disponibilidad), en los bloques siguientes.

- Manejo de materia prima húmeda: Puesto que dentro de los parámetros de entrada está la posibilidad de modificar la humedad de la materia prima, es claramente posible que el agua estequiométricamente necesaria para llevar a cabo la hidrólisis sea la contenida directamente en el flujo de entrada, como humedad. De no ser así el código permite la adición automática (sin intervención del usuario) de agua como reactivo extra a través de las corrientes laterales, tomando en cuenta el costo de las mismas y su impacto térmico estimado, de acuerdo a las consideraciones del modelo. Esto se da así no obstante es posible introducir más agua en cualquier bloque de ser necesario, mediante las corrientes extras.
- En este modelo no se permitió el ingreso de ningún compuesto, a excepción del agua, a través de las corrientes extras. Esto debido a que el resto son considerados compuestos clave (Hemicelulosa y Celulosa) para el producto final, o de potencial valor combustible (Lignina).

3. Solución Generada:

El tipo de Modelo generado fue un MILP, y el algoritmo seleccionado para su solución por el programa fue el Branch & Bound. (Para una descripción más detallada de dicho algoritmo consultar la referencia 25) .

La Matriz de existencia que seleccionó el algoritmo fue:

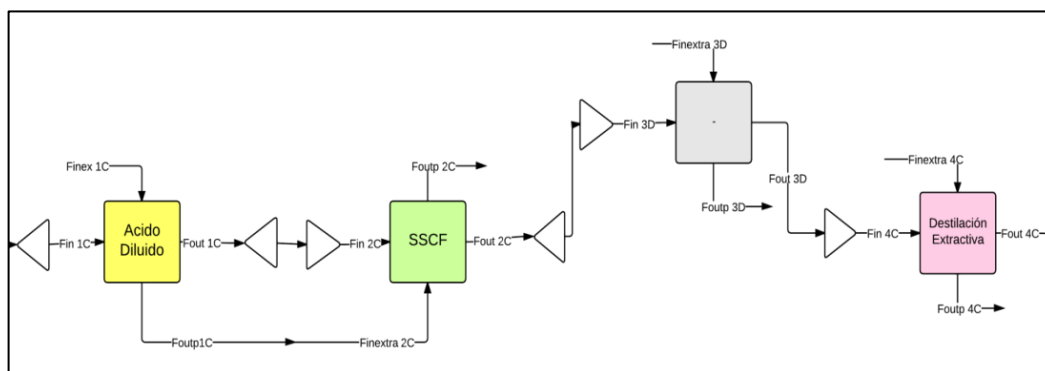
Tabla 2. Solución Óptima

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	1	0
C2	0	0	1	0
C3	0	0	0	1
C4	0	0	1	0

Fuente: Autor

De acuerdo a esta matriz, se obtiene la siguiente ruta de síntesis

Figura 6. Ruta de procesamiento propuesta



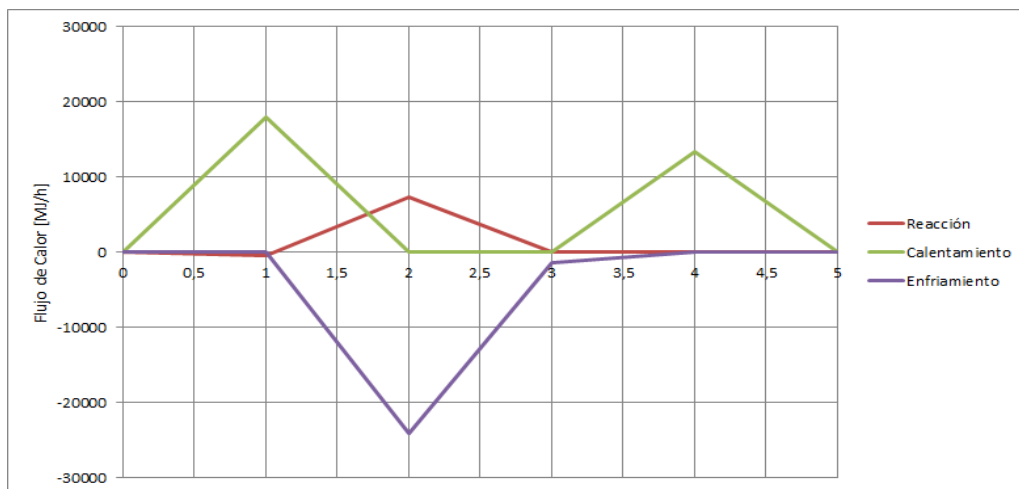
Fuente: Autor

Dicha ruta de síntesis se mantuvo como la mejor, según la forma de la función objetivo propuesta, para materia prima cuyas composiciones correspondieran con las del bagazo [24] en los tres compuestos de interés; agregándole el excedente 10 o 5% a la lignina, teniendo en cuenta su no reactividad fundamental dentro de las consideraciones de este modelo. Se varió el flujo inicial de materia prima un rango de entre 10000 y 500000 [kg/h], y la humedad entre el 20 y el 60% en peso. En ningún caso se observó cambio en la ruta seleccionada (exceptuando fluctuaciones entre bloques vacíos de la capa 3). Posiblemente esta tendencia se mantendría, por cuanto la ganancia operativa superaba significativamente los costos fijos de implementación. El valor de la función objetivo obtenido para esta ruta fue de 12500,839 millones de dólares anuales.

4. Exploración del Método

Para el caso de 50000 [kg/h] y 60% agua w/w, se propuso realizar gráficas del calor suministrado y tomado del sistema, así como el de reacción, por capa de procesamiento. Esto con el objeto de verificar el aporte del enfoque presentado en cuanto a la aproximación simplificada al balance de energía. Para realizar esto se hizo uso de la interacción de Lingo con Excel para automatizar la generación de las gráficas antes mencionadas. Es de notar que más allá de los valores puntuales calculados, lo que se buscaba era constatar la influencia de la realidad física tenida en cuenta (el cambio de temperatura de un bloque a otro) sobre las tendencias que marcaban las soluciones del problema de optimización. Forma de operación del algoritmo sobre la función objetivo. A continuación, la gráfica correspondiente al caso base, seguida de dos casos no óptimos, que se forzaron mediante restricciones de existencia arbitrarias. Cada gráfica, exceptuando la del caso base, es acompañada por su matriz de existencia y el valor de la función objetivo obtenido.

Figura 7. Interacciones térmicas caso base



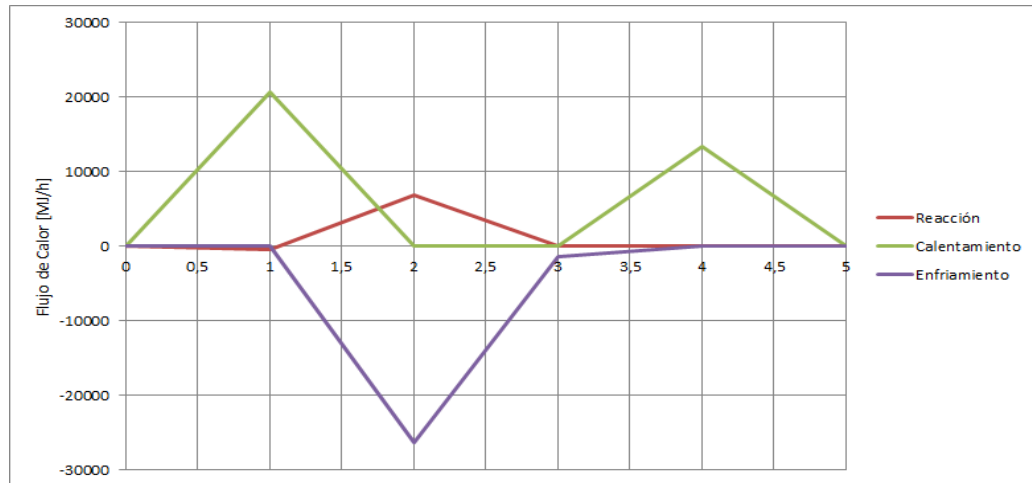
Fuente: Autor

Tabla 3. Solución alterna 1

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	1
C2	0	0	1	0
C3	0	0	1	0
C4	0	0	1	0

Fuente: Autor

Figura 8. Interacciones Térmicas sub-optimo1



Fuente: Autor

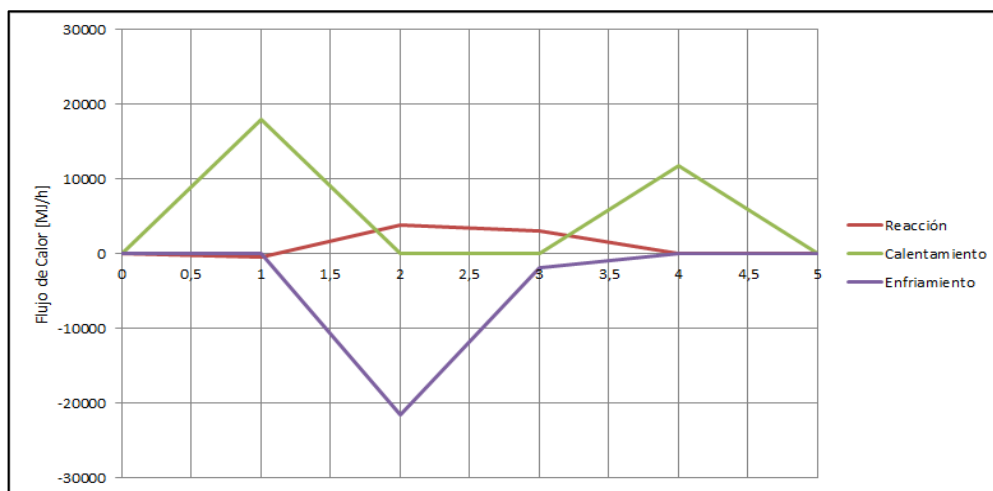
Valor Función Objetivo = 11278,615 Millones de dólares anuales

Tabla 4. Solución alterna 2

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	1	0
C2	0	1	0	0
C3	0	1	0	0
C4	0	1	0	0

Fuente: Autor

Figura 9. Interacciones Térmicas sub-óptimo 2



Fuente: Autor

Valor Función Objetivo = 11247,534 Millones de dólares anuales

La convención seguida en el planteamiento de estos gráficos sigue el principio de entrada y salida del sistema. El calor que se sustrae al sistema, como en una reacción endotérmica o la refrigeración, se considera negativo; mientras que el que se libera en el sistema, como en el calentamiento o una reacción exotérmica, se le da signo positivo.

Es posible observar que la optimización de la ruta de procesos, incluso mediante el uso de parámetros económicos, tiende hacia configuraciones más estables en términos térmicos, es decir, penaliza la interacción de bloques tecnológicos que impliquen fuertes cambios en condiciones de operación. Esto puede constatarse al comparar los picos y valles de la solución óptima (figura 7) con los de las soluciones alternas 1 (figura 8), 3 y 5 (Anexo H); encontrando que dichos picos y valles están achatados en la mencionada óptima.

No obstante lo anterior, es de señalar que la dinámica térmica no tiene la última palabra, como se ve en la solución alterna 4 (Anexo H), y algo en la 2 (figura 9). Lo observado en estas últimas dos figuras se debe a que hay más factores en evaluación que el costo de los acondicionamientos térmicos entre procesos, esto es, más variables de decisión incluidas en la función objetivo. De esto es de lo

que se trata el ejercicio, de tomar los ya tenidos en cuenta rendimientos tecnológicos, costos operacionales y costos de inversión inicial y sumarlos, de manera independiente, un estimado del costo de interacción entre procesos a temperaturas distintas.

Durante el desarrollo de esta primera aplicación del método de síntesis propuesto, fue necesario el acondicionamiento a muchas consideraciones la implementación de numerosas suposiciones y aproximaciones, las cuales hicieron al mismo menos conclusivo. Dentro de estas se debe destacar el uso de parámetros cuya calidad en último término determinan la precisión de los valores obtenidos puede encontrar justificación para lo dudoso de la magnitud del valor de la función objetivo. No obstante, como en todo proceso inicial de síntesis se espera que la proyección de ganancia sea mucho más alta que la real, y que se vaya ajustando a medida que se refinan los cálculos y datos usados, de ahí el término screening.

La dependencia con respecto a la veracidad e idoneidad de los datos con que se alimenta el modelo es entonces un factor clave en la aplicabilidad del mismo a cada caso. Esto es particularmente cierto si se tiene en cuenta la heterogeneidad con que se encuentran reportados en la literatura y la discriminación de escala y actualidad que se debe realizar. En este sentido un modelo simplificado que permite fácil entendimiento de las asunciones básicas, pero que a la vez permite tener en cuenta los fenómenos más relevantes para cada criterio de evaluación; se ofrece más atractivo que un complejo modelo fenomenológico que en su propósito de alta precisión arroje resultados volátiles y dispersos al acoplarlo con datos experimentales del tipo manejado en este trabajo.

5. CONCLUSIONES

- Los resultados avalan la propuesta de este método de síntesis, mediante el Modelo MILP, elaborado desde un enfoque que enriquece la estimación meramente económica basada en conversiones. Esto se logra aportando herramientas de juicio de interacción energética, a partir de la aplicación de conceptos básicos de balances de energía en vinculación coherente con los de masa ya planteados sin incurrir en complejidades matemáticas, innecesarias en un punto preliminar de diseño, que dificulten su solución.
- El ejercicio de aplicación al caso del etanol a partir de bagazo de caña se realizó, y la ruta obtenida fue coherente con la mayoría de la literatura referenciada, teniendo en cuenta los bajos costos de operación del ácido diluido y de la destilación extractiva, con respecto a las otras tecnologías consideradas, y la reducción en costos fijos (y a la larga también de operación) del SSCF al reducir el número de equipos y posibilitar el aprovechamiento de las azúcares pentosas.
- Es claro que el modelo genérico ofrece mucho potencial para un futuro robustecimiento con objeto de solucionar inconvenientes como la incompleta evaluación de los sistemas de destilación, (como en el manejo de sistemas de destilación o la diversificación de reacciones que inhiban la conversión de ciertas especies o disminuyan la selectividad del conjunto hacia el producto deseado) dada su estructura que propende a la intuitiva interpretación de sus elementos como nuevas opciones de diseño. Esto también implica versatilidad ofrecida frente a diversas tecnologías aplicadas a diferentes campos. aplica para el caso realizado, en cuanto a que es posible una tendiente mejora hacia la inclusión de reactivos extras en exceso o subrutinas de optimización para tener en cuenta ciclos

6. CITAS BIBLIOGRAFICAS

- [1]. Renewable Fuels Association, "RFA 2012 Ethanol Industry Outlook," Aug. 2012.
- [2]. Chovau, S., Degrauwe, D., der Bruggen, B.V. (2013). Critical analysis of techno-economic estimates for the production cost of lignocellulosic bio-ethanol. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 26 307–321.
- [3]. Renewable Fuels Association, "RFA 2013 Ethanol Industry Outlook," 2013.
- [4]. UPME, IDEAM, COLCIENCIAS, UIS. Atlas del potencial Energético de la Biomasa Residual en Colombia. 2010. ISBN: 978-958-8504-59-9.
- [5]. CGEE, C.B.Y. (2008). *Producción de Bioetanol in Bioetanol de Caña de Azúcar: Energía para el Desarrollo sostenible*: Rio de Janeiro. Brasil. p. 69-70.
- [6]. Kurian, J., Gopu K, Raveendran N, & Hussain A (2013). Feedstocks, logistic and pre-treatment processes for sustainable lignocellulosic biorefineries: A comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 25 205–219.
- [7]. Mooda, S. H, Hossein G.A, Tabatabaei, M., Gholamreza, S. J., Hassan, N. G., & Gholami, M., (2013). Lignocellulosic biomass to bioethanol, a comprehensive review with a focus on pretreatment. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 27 77–93
- [8]. Quintero Dallos, V (2009). Evaluación del potencial de producción de etanol combustible a partir de biomasa secundaria disponible en la agroindustria azucarera colombiana. Tesis de magíster, Universidad Industrial de Santander.
- [9]. Hamelinck, C. N., Van Hooijdonk, G. & Faaij, A. P. C (2003). Prospects for ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance as development progresses, Report NWS-E-2003-55. Utrecht University, Copernicus Institute-Science Technology Society.
- [10]. Ojeda Delgado, K. (2011). Aplicación de análisis exergético para la evaluación de procesos de producción de bioetanol de segunda generación. Tesis doctoral, Universidad Industrial de Santander.
- [11]. Dias M. O., Ensinasa A. V., Nebrac S. A., Filho R, M, (2009). Production of bioethanol and other bio-based materials from sugarcane bagasse: Integration to conventional bioethanol production process. *chemical engineering research and design* 87 1206–1216.
- [12]. F. Coppola S. Bastianoni H., Østergaard (2009). Sustainability of bioethanol production from wheat with recycled residues as evaluated by Energy assessment. *biomass and bioenergy* 33 1626–1642.

- [13]. Quintero, J. A., Montoya M., Sánchez Ó. J., Cardona C. A., (2007). Evaluation of Fuel Ethanol Dehydration Through Process Simulation. Facultad De Ciencias Agropecuaria 5
- [14]. Mosier, N., Wyman , C., Dale, B., Elander, R., Lee, Y. Y., Holtzapple , M. L., (2005). Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. *Bioresource Technology*. Vol 96 P 673-686.
- [15]. Hamelinck, C. N., Van Hooijdonk, G., FAAIJ, A. P. C (2005). Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle- and long-term. *Biomass & Bioenergy*. 28 384-410.
- [16]. Li X., Kraslawski A., (2004). Conceptual process synthesis: past and current trends. *Chemical Engineering and Processing* 43 589–600.
- [17]. Cheng Seong Khor, & Xiao Qi Yeoh (2010). Optimization of Petroleum Refinery Configuration Design with Logic Propositions. *World Academy of Science, Engineering and Technology* 44
- [18]. Thomas F. Edgar, David M. Himmelblau. Optimization of chemical processes. Leon S Leasdon. 2 Edicion. ISBN 0-07-039359-1
- [19]. Viet Pham & Mahmoud El-Halwagi (2011). Proces Synthesis and optimization of biorefinery configuration. Published online June20, in Wiley Online library.
- [20]. Grossmann I.E., Caballero J.A. H. & Yeomans (2000). Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems. *Latin American Applied Research* 30 263-284
- [21]. Moncada J., El-Halwagi M.M., Cardona C. A., (2012). Techno-economic analysis for a sugarcane biorefinery: Colombian case. *Bioresource Technology*.
- [22]. Wooley R.J., Putsche V., Development of an ASPEN PLUS PhysicalProperty Database for Biofuels Components. NREL/MP-425-20685
- [23]. M.A. Steffens, E.S. Fraga, I.D.L. Bogle (1999). Multicriteria process synthesis for generating sustainable and economic bioprocesses. *Computers and Chemical Engineering* 23 1455–1467
- [24]. Conde M. C., Jimenez-Guiterrez A., El-Halwagi M.M., (2012). A comparison of pretreatment methods for bioethanol production from lignocellulosic materials. *Process Safety and Environmental Protection* 90 189-20
- [25]. Floudas A. Cristodoulos. Non-Linear and Mixed-Integer Optimization. Oxford University Press. ISBN 0-19-510056-5. Pag 98

[26] Bao. B., Ng D., Tay D., Jiménez-Gutierrez A., El-Halwagi M. (2011) A shortcut method for the preliminary synthesis of process-technology pathways: An optimization approach and application for the conceptual design of integrated biorefineries. *Computers and Chemical Engineering*. 35 1374 – 1383.

[27] Sánchez O. J., Gutiérrez L.F., Cardona C. A., *Diseño Conceptual de Procesos, Producción de Biocombustibles*. Editorial Universidad nacional de Colombia. ISBN 978-958-44-5660-1.

BIBLIOGRAFÍA

- Bao. B., Ng D., Tay D., Jiménez-Gutierrez A., El-Halwagi M. (2011) A shortcut method for the preliminary synthesis of process-technology pathways: An optimization approach and application for the conceptual design of integrated biorefineries. *Computers and Chemical Engineering*. 35 1374 – 1383.
- CGEE, C.B.Y. (2008). Produccion de Bioetanol in Bioetanol de Caña de Azúcar: Energía para el Desarrollo sostenible: Rio de Janeiro. Brasil. p. 69-70.
- Chovau, S., Degrauwe, D., der Bruggen, B.V. (2013). Critical analysis of techno-economic estimates for the production cost of lignocellulosic bio-ethanol. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 26 307–321.
- Conde M. C., Jimenez-Gutierrez A., El-Halwagi M.M., (2012). A comparison of pretreatment methods for bioethanol production from lignocellulosic materials. *Process Safety and Environmental Protection* 90 189-20
- Coppola F., Bastianoni S., Østergaard H., (2009). Sustainability of bioethanol production from wheat with recycled residues as evaluated by Energy assessment. *biomass and bioenergy* 33 1626–1642.
- Dias M. O., Ensinasa A. V., Nebrac S. A., Filho R, M, (2009). Production of bioethanol and other bio-based materials from sugarcane bagasse: Integration to conventional bioethanol production process. *chemical engineering research and design* 87 1206–1216.
- Floudas A. Cristodoulos. *Non-Linear and Mixed-Integer Optimization*. Oxford University Press. ISBN 0-19-510056-5. Pag 98
- Grossmann I.E., Caballero J.A. H. & Yeomans (2000). Advances in mathematical programming for the synthesis of process systems. *Latin American Applied Research* 30 263-284
- Hamelinck, C. N., Van Hooijdonk, G. & Faaij, A. P. C (2003). Prospects for ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance as development progresses, Report NWS-E-2003-55. Utrecht University, Copernicus Institute-Science Technology Society.

- Hamelinck, C. N., Van Hooijdonk, G., FAAIJ, A. P. C (2005). Ethanol from lignocellulosic biomass: techno-economic performance in short-, middle- and long-term. *Biomass & Bioenergy*. 28 384-410.
- Khor C. S., Yeoh X. Q., (2010). Optimization of Petroleum Refinery Configuration Design with Logic Propositions. *World Academy of Science, Engineering and Technology* 44
- Kurian.J.,Gopu K, Raveendran N, & Hussain A (2013). Feedstocks,logistic sand pre-treatment processes for sustainable lignocellulosic biorefineries: Acomprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 25 205–219.
- Li X., Kraslawski A., (2004). Conceptual process synthesis: past and current trends. *Chemical Engineering and Processing* 43 589–600.
- Moncada J., El-Halwagi M.M., Cardona C. A., (2012). Techno-economic analysis for a sugarcane biorefinery: Colombian case. *Bioresource Technology*.
- Mooda, S. H, Hossein G.A, Tabatabaei, M., Gholamreza, S. J., Hassan, N. G., & Gholami, M., (2013). Lignocellulosic biomass to bioethanol, a comprehensive review with a focus on pretreatment. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 27 77–93
- Mosier, N., Wyman , C., Dale, B., Elander, R., Lee, Y. Y., Holtzapple , M. L., (2005). Features of promising technologies for pretreatment of lignocellulosic biomass. *Bioresource Technology*. Vol 96 P 673-686.
- Ojeda Delgado, K. (2011). Aplicación de análisis exergético para la evaluación de procesos de producción de bioetanol de segunda generación. Tesis doctoral, Universidad Industrial de Santander.
- Pham V., El-Halwagi M. M., (2011). Proces Synthesis and optimization of biorefinery configuration. Published online June20, in Wiley Online library.
- Quintero Dallos, V (2009). Evaluación del potencial de producción de etanol combustible a partir de biomasa secundaria disponible en la agroindustria azucarera colombiana. Tesis de magíster, Universidad Industrial de Santander.
- Quintero, J. A., Montoya M., Sánchez Ó. J., Cardona C. A., (2007). Evaluation of Fuel Ethanol Dehydration Through Process Simulation. *Facultad De Ciencias Agropecuaria* 5

- Renewable Fuels Association, “RFA 2012 Ethanol Industry Outlook,” Aug. 2012
- Sánchez O. J., Gutiérrez L.F., Cardona C. A., Diseño Conceptual de Procesos, Producción de Biocombustibles. Editorial Universidad nacional de Colombia. ISBN 978-958-44-5660-1.
- Steffens M. A., Fraga E.S., Bogle I.D.L., (1999). Multicriteria process synthesis for generating sustainable and economic bioprocesses. *Computers and Chemical Engineering* 23 1455–1467
- Thomas F. Edgar, David M. Himmelblau. Optimization of chemical processes. Leon S Leasdon. 2 Edicion. ISBN 0-07-039359-1
- UPME, IDEAM, COLCIENCIAS, UIS. Atlas del potencial Energético de la Biomasa Residual en Colombia. 2010. ISBN: 978-958-8504-59-9.
- Wooley R.J., Putsche V., Development of an ASPEN PLUS PhysicalProperty Database for Biofuels Components. NREL/MP-425-20

ANEXO A. Tabla de descripción de Pretratamientos.

Tipo	Método	Descripción	Efecto producido
Físicos	<i>Reducción de tamaño</i>	Molienda o trituración usando molinos vibratorios de bolas, cuchillas o martillo	Reduce cristalinidad de celulosa y tamaño de partícula desde 10-30 hasta 0,2-2 mm
	<i>Pirólisis</i>	Temperaturas superiores a 300 °C o inferiores usando como catalizadores cloruro de zinc y carbonato de calcio	Descomposición de la celulosa produciendo gases y carbón
	<i>Irradiación de alta energía</i>	Exposición de las fibras a radiación con rayos gamma o electrones.	Cambios en la estructura, reactividad y propiedades químicas y mecánicas de la celulosa
	<i>Explosión con vapor</i>	Se trata el material con vapor a alta presión, reduciendo luego la presión rápidamente, para generar una descompresión explosiva a 160-260 °C (0,69-4,83 MPa) por varios minutos antes de exponer el material a presión	Formación de inhibidores, ocurre despolimerización de la celulosa y redistribución de la lignina.

Físico-químicos		atmosférica.	
	<i>Agua caliente</i>	Hidrotermólisis. Proceso de flujo transversal, en donde se pasa agua caliente presurizada sobre el material, a temperaturas entre 170 y 230 °C durante 1-46 minutos	Despolimerización de celulosa, hidrólisis de hemicelulosas y solubilización parcial de lignina.
	<i>Explosión de fibra con amoníaco</i>	El material es expuesto a amonio líquido a temperatura y presión altas, y luego se somete a presión atmosférica rápidamente. Relaciones de 1-2 Kg. Amonio/ Kg. Seco de biomasa, a 90°C. 30 min.	Despolimerización parcial de celulosa, solubilización de lignina. No solubilización hemicelulosa no inhibidores y no lavado
	<i>Explosión de CO₂</i>	Se emplean alrededor de 4 kg. de dióxido de carbono/ Kg. obteniendo rendimientos de 75% de glucosa	No forma compuestos inhibitorios, se obtiene conversión >75% de la hidrólisis de celulosa.
	<i>Ozonólisis</i>	Reacción con ozono a condiciones ambiente.	Degradación de lignina, no forma inhibidores y se obtiene 75% de conversión durante

Químicos			hidrólisis.
	<i>Hidrólisis con ácido diluido</i>	A temperaturas superiores a 160 °C en procesos de flujo continuo para relaciones de sólidos menores al 5-10% y a temperaturas inferiores a 160 °C. En procesos tipo Batch para relaciones de sustrato superiores al 10-40% durante 30 minutos.	Hidrólisis de hemicelulosas, se requiere neutralizar pH para posterior hidrólisis. Ocurre despolimerización parcial de celulosa, redistribución de lignina.
	<i>Hidrólisis con ácido concentrado</i>	Ácido sulfúrico al 10-30%, T=170-190 °C, se requieren tiempos mayores a los necesarios en la técnica que usa ácido diluido.	Requiere recuperación del ácido y de recipientes resistentes a la corrosión.

ANEXO B. PARÁMETROS DE BLOQUES TECNOLÓGICOS

	Temperaturas Bloques			K
	O1	O2	O3	O4
C1	393,15	463,15	433,15	453
C2	320,15	311,15	308,15	298
C3	309,15	310	298	298
C4	398	398	398	398

	Costo Operativo			\$/h/kg
	O1	O2	O3	O4
C1	0,00153	0	0,00449994	0,01526
C2	0,00536977	0,004886	0,004886	0
C3	0,004886	0,0065065	0	0
C4	0,00947821	0,00734581	0,00658638	0,006355308

	Costos Fijos			\$
	O1	O2	O3	O4
C1	21200000	15368000	16435000	15368000
C2	12012000	12012000	14616000	0
C3	14616000	14616000	0	0
C4	14156063	9547963	9525920	12809706

	Tiempos de Residencia			horas
	O1	O2	O3	O4
C1	0,03333333	0,25	0,33333333	1
C2	72	24	24	0
C3	46	12	0	0
C4	1	1	1	1

	Capacidad			kg o kg/h
	O1	O2	O3	O4
C1	50000	50000	50000	50000
C2	25000	25000	50000	1
C3	25000	35000	1	1
C4	152153,476	152153,476	152153,476	152153,476

ANEXO C. Factor Límite de Conversión

	Hemicelulosa			
	O1	O2	O3	O4
C1	1	0,315	0,1	0,2224
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Celulosa			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0,9438	0,9374	0,8814
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Lignina			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Pentosas (Xylosa)			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	0,15	0
C3	0	0,2	0	0
C4	0	0	0	0
	Hexosas (glucosa)			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0,06	0,08	0
C3	0,25	0	0	0
C4	0	0	0	0

	Etanol			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Agua			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Hemi_pretratada			
	O1	O2	O3	O4
C1	1	0,5769	0,377	0,5461
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	Celu_pretratada			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0,948	0,9374	0,9899
C2	0,35	0,12	0,2	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
	CO2			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0

ANEXO D. Factor Binario de existencia de reacciones, $B_{i,o,r}$

Reacción 1				
	O1	O2	O3	O4
C1	1	1	1	1
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
Reacción 2				
	O1	O2	O3	O4
C1	1	1	1	1
C2	1	1	1	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
Reacción 3				
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	0	1	0
C3	0	1	0	0
C4	0	0	0	0
Reacción 4				
	O1	O2	O3	O4
C1	0	0	0	0
C2	0	1	1	0
C3	1	0	0	0
C4	0	0	0	0
Reacción 5				
	O1	O2	O3	O4
C1	1	1	1	1
C2	0	0	0	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0
Reacción 6				
	O1	O2	O3	O4
C1	1	1	1	1
C2	1	1	1	0
C3	0	0	0	0
C4	0	0	0	0

ANEXO E. Coeficientes de Separación, $Y_{i,e,o}$ y Coeficientes estequiométricos $Coef_e$

Operador 1										
	Hemi	Cel	Lig	C5	C6	Etoh	agua	Hem P	Cel P	CO2
C1	1	1	0,86	0	0	0	0,1	0	0	0
C2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C4	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Operador 2										
	Hemi	Cel	Lig	C5	C6	Etoh	agua	Hem P	Cel P	CO2
C1	1	1	1	0	0	0	0,1	0	0	0
C2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C4	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Operador 3										
	Hemi	Cel	Lig	C5	C6	Etoh	agua	Hem P	Cel P	CO2
C1	1	1	1	0	0	0	0,1	0	0	0
C2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C4	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Operador 4										
	Hemi	Cel	Lig	C5	C6	Etoh	agua	Hem P	Cel P	CO2
C1	1	1	0,26	0	0	0	0,1	0	0	0
C2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0
C4	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0

- Coeficientes Estequiométricos

	Hemi	Cel	Lig	C5	C6	Etoh	Agua	Hem P	Cel P	CO2
R1	0	0	0	1	0	0	-1	-1	0	0
R2	0	0	0	0	1	0	-1	0	-1	0
R3	0	0	0	-3	0	5	0	0	0	5
R4	0	0	0	0	-1	2	0	0	0	2
R5	-1	0	0	0	0	0	0	1	0	0
R6	0	-1	0	0	0	0	0	0	1	0

ANEXO F. Código modelo de optimización Lingo

```

model:

title: modelo_21;

!UNIDADES DE VARIABLES A USAR;

!
  variable                nombre(s)                Unidades
FLUJO MÁSIICO =           Fin, Fout, Foutp, Finex, finfict        kg/h
FLUJO MOLAR =             mfout, mfin, mfoutp, mfinex, mfouttot    kmol/h
TIEMPO =                  t, tres                                h
PESO MOLECULAR =          pm                                kg/kmol
ENTALPIA(std form) =      h0                                kj/kmol
CALOR ESPECÍFICO =        Cp                                kj/(kmol*K)
CALOR =                   qe, qs, qserv1,qserv2, qr            kJ
RENDIMIENTO =             y                                kmol / kmol producido
CAPACIDAD BASE =          capacidad                          kg/h (CONTINUO)
EQUIPOS                    kg (m^3, BATCH)
COSTO FIJO BASE =         cfix                              Dolares
COSTOS OPERATIVOS =      cop                                Dolares*h/kg
;

sets:

capas/1..4/:D;
especies/hem, cel, lig, c5, c6, etoh, h2o,hemp,celp, co2/: pm,    h0, cp,
p,cpa, cpb, cpc, cpd;
operador/A..D/;
reaccion/R1..R6/;
Bx(capas, operador, reaccion): X, b;
Bx2(capas, operador, reaccion, especie): mfrxn;
Bc(reaccion, especie):coef;
Bloques(capas, operador): fout, fin, finfict, ex, foutp, finex, lim, brI,
brII, brIII, brIV, brV, brVI,brVII, brVIII,
t, qserv1, qserv2, qe, qs, qr, qex, cfix, cop, tres, Nc, N, capacidad,
limI, limII, limIII, limIV, limV, limVI,      limVII,      limVIII, limIX,
limX, limXI,fhemi, fcel, flig, fxilosa, fglucosa, fetoh, fh2o, fhemp,
fcelp, fco, fvapor;
Bo2(capas, especie): yI, yII, yIII, yIV;
Bo(capas, especie, operador): mfin, mfout, mfoutp, mfouttot, mfinex,
mfrxntot, y, limconv;

end sets

```

```

@for(Bloques:@bin(ex));
@for(Bx:@bin(b));
@for(Bo:@free(mfrxntot));
@for(Bx2:@free(mfrxn));
@for(Bloques:@free(qr));
@for(Bloques:@free(qe));
@for(Bloques:@free(qs));
@for(Bloques:@free(qex));

data:

!exponente para cálculo de costos fijos;

A = ?;

!Años en los que va a evaluar el proyecto;

years_Evaluacion = ?;

c_hemi,c_cel, c_H2O, fmp = @OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

c_c5 = 0;
c_c6 = 0;
c_etoH = 0;
c_hemp = 0;
c_celp = 0;
c_co2 = 0;
c_vapor = 0;

!Llamado de datos de la hoja de excel;
capacidad, tres, cop, cfix, t, cp, h0, pm, tref, cenf, ccal, text, tmp, coef,
p, D =
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

brI, brII, brIII, brIV, brV, brVI, brVII, brVIII =
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

limI, limII, limIII, limIV, limV, limVI, limVII, limVIII, limIX, limX,
limXI =
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

yI, yII, yIII, yIV =
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

cpa, cpb, cpc, cpd =
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX');

!datos exportados;
@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX')=
fout, fin, ex, foutp, finex, n, qserv1, qserv2, qe, qs, qr, qex,x;

@OLE('E:\Uis\Proyecto\modelos\datos1.XLSX')=

```

```

fhemi, fcel, flig, fxilosa, fglucosa, fetoh, fh2o, fhemip, fcelp, fco,
fvapor;
init:

mfoutp= 0 ;
fout= 0 ;
foutp= 0 ;
fin= 0 ;
mfin= 0 ;
mfout= 0 ;
x=0;
end init

!limites extras;
limite_extras = fmp;
!Armado de Información tridimensional;

@for(capas(i):
    @for(operador(o):
        brI(i,o) = b(i,o,1);
        brII(i,o) = b(i,o,2);
        brIII(i,o) = b(i,o,3);
        brIV(i,o) = b(i,o,4);
        brV(i,o) = b(i,o,5);
        brVI(i,o) = b(i,o,6);
        brVII(i,o) = b(i,o,7);
        brVIII(i,o) = b(i,o,8);
    );
);

@for(capas(i):
    @for(operador(o):
        limI(i,o) = limconv(i,1,o);
        limII(i,o) = limconv(i,2,o);
        limIII(i,o) = limconv(i,3,o);
        limIV(i,o) = limconv(i,4,o);
        limV(i,o) = limconv(i,5,o);
        limVI(i,o) = limconv(i,6,o);
        limVII(i,o) = limconv(i,7,o);
        limVIII(i,o) = limconv(i,8,o);
        limIX(i,o) = limconv(i,9,o);
        limX(i,o) = limconv(i,10,o);
        limXI(i,o) = limconv(i,11,o);
    );
);

@for(capas(i):
    @for(especies(e):
        yI(i,e) = y(i,e,1);
        yII(i,e) = y(i,e,2);
        yIII(i,e) = y(i,e,3);
        yIV(i,e) = y(i,e,4);
    );
);

```

```

!RESTRICCIONES DE ENTRADA;

!masa;

[comp_lignina] c_lig = 1 - c_cel - c_hemi - c_h2o;! - c_eto;! - c_c5 -
c_c6;

[SPLITTER_0_h] @sum(operador(j): mfin(1,1,j))= (fmp*c_hemi)/pm(1);
[SPLITTER_0_c] @sum(operador(j): mfin(1,2,j))= (fmp*c_cel)/pm(2);
[SPLITTER_0_l] @sum(operador(j): mfin(1,3,j))= (fmp*c_lig)/pm(3);
[SPLITTER_0_C5] @sum(operador(j): mfin(1,4,j))= (fmp*c_c5)/pm(4);
[SPLITTER_0_C6] @sum(operador(j): mfin(1,5,j))= (fmp*c_c6)/pm(5);
[SPLITTER_0_eto] @sum(operador(j): mfin(1,6,j))= (fmp*c_eto)/pm(6);
[SPLITTER_0_H2O] @sum(operador(j): mfin(1,7,j))= (fmp*c_h2o)/pm(7);
[SPLITTER_0_HEMP] @sum(operador(j): mfin(1,8,j))= (fmp*c_hemp)/pm(8);
[SPLITTER_0_CELP] @sum(operador(j): mfin(1,9,j))= (fmp*c_celp)/pm(9);
[SPLITTER_0_CO2] @sum(operador(j): mfin(1,10,j))= (fmp*c_co2)/pm(10);
[SPLITTER_0_vapor] @sum(operador(j): mfin(1,11,j))=
(fmp*c_vapor)/pm(11);

!energía;

@for(operador(o):
[energia_inicial] qe(1,o) - qr(1,o) - qs(1,o) - qserv1(1,o) + qserv2(1,o)
+ qex(1,o)=0;
[energ_flujo_entrada_1] qe(1,o)=@sum(especies(e):
mfin(1,e,o)*(cpa(e)*(tmp-tref)+Cpb(e)*(((tmp-tref)^2)/2)+Cpc(e)*(((tmp-
tref)^3)/3)+Cpd(e)*(((tmp-tref)^4)/4)));
[energ_flujo_salida_1] qs(1,o)=
@sum(especies(e):(mfout(1,e,o)+mfoutp(1,e,o))*(cpa(e)*(t(1,o)-
tref)+Cpb(e)*(((t(1,o)-tref)^2)/2)+Cpc(e)*(((t(1,o)-
tref)^3)/3)+Cpd(e)*(((t(1,o)-tref)^4)/4)));
[energ_flujo_extra_1] qex(1,o)=
@sum(especies(e):mfinex(1,e,o)*(Cpa(e)+Cpb(e)*(text-tref)+Cpc(e)*(text-
tref)^2+Cpd(e)*(text-tref)^3));
[energ_reaccion_1] qr(1,o)
=@sum(reaccion(r):x(1,o,r)*b(1,o,r)*@sum(especies(e):coef(r,e)*h0(e)));
);

!BALANCE DE ENERGÍA;

@for(capas(i)| i#gt#1:

[bal_energ_inter] @sum(operador(l):qe(i,l))=@sum(operador(o):qs(i-1,o));

@for(operador(o):
!qserv1 = enfriamiento, qserv2 = calentamiento;
[energia_flujo_entrada] qe(i,o) - qr(i,o) -qs(i,o)-
qserv1(i,o)+qserv2(i,o)+qex(i,o)=0;
[energ_flujo_salida] qs(i,o)=
@sum(especies(e):(mfout(i,e,o)+mfoutp(i,e,o))*(cpa(e)*(t(i,o)-

```

```

tref)+Cpb(e)*(((t(i,o)-tref)^2)/2)+Cpc(e)*(((t(i,o)-
tref)^3)/3)+Cpd(e)*(((t(i,o)-tref)^4)/4));
[energ_flujo_extra] qex(i,o)=
@sum(especies(e):mfinex(i,e,o)*(cpa(e)*(text-tref)+Cpb(e)*(((text-
tref)^2)/2)+Cpc(e)*(((text-tref)^3)/3)+Cpd(e)*(((text-tref)^4)/4));
[energ_reaccion] qr(i,o)
=@sum(reaccion(r):x(i,o,r)*b(i,o,r)*@sum(especies(e):coef(r,e)*h0(e)));
);

!BALANCES POR ESPECIE o compuesto;

@for(especies(e):
[SPLITTER_SEPARADOR] @sum(operador(k): mfin(i,e,k))=
@sum(operador(k):mfout(i-1,e,k));
);
);

@FOR(capas(i):
@FOR(operador(o):

!COMPOSICIONES;

[comp_in] fin(i,o)=@sum(especies(k): mfin(i,k,o)*pm(k));
[comp_out] fout(i,o)=@sum(especies(k): mfout(i,k,o)*pm(k));
[comp_outp] foutp(i,o)=@sum(especies(k): mfoutp(i,k,o)*pm(k));
[comp_ext] finex(i,o)=@sum(especies(k):mfinex(i,k,o)*pm(k));

!LIMITES Y RESTRICCIÓN DE SELECCIÓN;

[calc_finextot]finextot = @sum(Bloques:finex);

[calc_bigM_masa](fmp+limite_extras)=big_M_masa;

!PROBLEMA CON LA ESCALA DEL BIG_M DE ENERGIA;
[calc_bigM_energia]coefenergia*big_M_masa = big_M_energia;
[calc_coefenergia]@abs((@sum(especies(e):cpa(e)+Cpb(e)*(tmp-
tref)+Cpc(e)*(tmp-tref)^2+Cpd(e)*(tmp-
tref)^3)+@sum(especies(e):h0(e))))*0.01= coefenergia;

[lim_extras]finextot<=limite_extras;

[lim_1] lim(i,o)=big_M_masa*ex(i,o);
[lim_2] fin(i,o)<=lim(i,o);
[lim_3] fout(i,o)<=lim(i,o);
[lim_4] foutp(i,o)<=lim(i,o);
[lim_5] finex(i,o)<=lim(i,o);
[lim_6Q] qserv1(i,o)<= big_M_energia*ex(i,o);
[lim_7Q] qserv2(i,o)<= big_M_energia*ex(i,o);

!Modelo de reacción 3;

```

```

@for(especies (e):
[balance_reaccion] mfin(i,e,o)+ mfinex(i,e,o)-mfout(i,e,o)-
mfoutp(i,e,o)+ mfrxntot(i,e,o) = 0;
[flujo_reaccion] mfrxntot(i,e,o) = @sum(reaccion(r):mfrxn(i,o,r,e));
[perdidas_eficiencia] mfout(i,e,o)=mfouttot(i,e,o)*y(i,e,o);
[sumatoria_perdidas] mfout(i,e,o)+mfoutp(i,e,o)=mfouttot(i,e,o);

@for(reaccion(r):
[reacciones_individuales] mfrxn(i,o,r,e)=x(i,o,r)*coef(r,e)*b(i,o,r);

@for(especies(e)|e#ne#7 #and# i#ne#3 #and# i#ne#2:
[reactivo_exceso_1] mfinex(i,e,o)=0
    );
);

!FIN MODELO REACCION;
!limitación de conversión;
@for(capas(i)| i#ne#1:
    @for( operador(o):
        @for(reaccion(r)| b(i,o,r) #ne#0:
            @for( especies(e)| coef(r,e)#lt# 0 :
[limitacion_rendimiento] mfouttot(i,e,o)>= (mfin(i,e,o)+
mfinex(i,e,o))*(limconv(i,e,o));
            );
        );
    );
);

@for(capas(i)| i#eq#1:
    @for( operador(o):
        @for(reaccion(r)| b(i,o,r) #ne#0:
            @for( especies(e)| coef(r,e)#lt# 0 :
[limitacion_rendimiento_1] mfouttot(i,e,o)>= (mfin(i,e,o)+
mfinex(i,e,o))*(limconv(i,e,o));
            );
        );
    );
);

!costos fijos para bloques;

!REACTORES BATCH;
@for(capas(i)| i #lt# 2:
    @for( operador(o):
[rest_fixcost_2] N(i,o)=
(fin(i,o)+finex(i,o)*tres(i,o))/(capacidad(i,o));
[rest_fixcost_3] Nc(i,o) = 0;

    );
);

```

```

!REACTORES EN CONTÍNUO;
@for (capas(i) | i #ge# 2 :
    @for (operador(o):
[rest_fixcost_5] N(i,o) = ((fin(i,o)+finex(i,o))/capacidad(i,o))^(A);
[rest_fixcost_6] Nc(i,o) = 0;

    );
);

!CONTROL EXISTENCIA;

@for (capas(i) | i#ne#3:
[CONT_EXIST] @sum(operador(k): ex(i,k)) = 1;
);

[CONT_EXIST_2] @sum(operador(k): ex(3,k)) <= 2;
@for (especies(e):
[restric_operac_2] mfout(2,e,1) + mfout(2,e,2)=
mfin(3,e,1)+mfin(3,e,2);
);

!RESTRICCIONES ESPECÍFICAS PARA EL CASO A EVALUAR;
!restricciones de flujo especificas;

[CONT_EXIST_3] ex(2,2)+ex(3,1)<=1;
[CONT_EXIST_6] ex(2,3)+ex(3,1)+ex(3,2)<=1;
[CONT_EXIST_4] ex(3,1) + ex(3,3) + ex(3,4) < = 1;
[CONT_EXIST_5] ex(3,2) + ex(3,3) + ex(3,4) <= 1;

!Aislamiento del fermentador de Xylosa;
@for (especies(e):
[ent_fermt_C5] @sum(operador(o):
mfoutp(1,e,o)=mfinex(3,e,2)+mfinex(2,e,3)+mfinex(2,e,4)
);
@for (operador(o) | o#ne# 2:
    @for (especies(e) | e#ne#7:
[reactivo_exceso_2] mfinex(3,e,o)=0
    );
);
@for (operador(o) | o#lt# 3:
    @for (especies(e) | e#ne#7:
[reactivo_exceso_3] mfinex(2,e,o)=0
    );
);

!forzar conversion pretratamiento;
@for (operador(o):
x(1,o,6)=((fmp*c_cel)/pm(2))*(1-limconv(1,2,o))*ex(1,o);
);

!calcula de corrientes másicas de compuestos;

```

```

@for (capas(i) :
    @for (operador(o) :

fhemi(i,o)= (mfout(i,1,o)+mfoutp(i,1,o))*pm(1);
fcel(i,o)= (mfout(i,2,o)+mfoutp(i,2,o))*pm(2);
flig(i,o)= (mfout(i,3,o)+mfoutp(i,3,o))*pm(3);
fxilosa(i,o)= (mfout(i,4,o)+mfoutp(i,4,o))*pm(4);
fglucosa(i,o)= (mfout(i,5,o)+mfoutp(i,5,o))*pm(5);
fetoh(i,o)= (mfout(i,6,o)+mfoutp(i,6,o))*pm(6);
fh2o(i,o)= (mfout(i,7,o)+mfoutp(i,7,o))*pm(7);
fhemip(i,o)= (mfout(i,8,o)+mfoutp(i,8,o))*pm(8);
fcelp(i,o)= (mfout(i,9,o)+mfoutp(i,9,o))*pm(9);
fco(i,o)= (mfout(i,10,o)+mfoutp(i,10,o))*pm(10);
fvapor(i,o)= (mfout(i,11,o)+mfoutp(i,11,o))*pm(11);

    );
);
!ex(1,3)+ex(2,3)<=1;
!ex(2,3)+ex(3,3)<=1;
!ex(1,4)+ex(2,3)<=1;
!ex(2,3)+ex(4,3)<=1;
max = (@sum(operador(k):mfout(4,6,k)*pm(6))*p(6) -
@sum(capas(i):@sum(operador(o):@sum(especies(e)|e#eq#7:mfinex(i,e,o)*pm(e)
)*p(e))))-fmp*(32500/1900)
-
@sum(capas(i):@sum(operador(o):(fin(i,o)+finex(i,o))*cop(i,o)+qserv1(i,o)
*cenf+qserv2(i,o)*ccal))*8000
-
(1/years_Evaluacion)*(@sum(capas(i):@sum(operador(o):n(i,o)*cfix(i,o))));

```

ANEXO G. Convenciones e Índices de las Especies (compuestos) y las

Reacciones				
Nombre	Reactivo	producto	Descripción	Reacción
Reacción 1	Hem_P + H ₂ O	Pentosas (Xilosa)	hidrólisis Hemicelulosa	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_5$
Reacción2	Cel_P + H ₂ O	Hexosas (glucosa)	hidrólisis Celulosa	$C_6H_{10}O_5 + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_6$
Reacción 3	Pentosas (Xilosa)	Etanol	Fermentacion C5	$3C_5H_{10}O_5 \rightarrow 5C_2H_5OH + 5CO_2$
Reacción 4	Hexosas (glucosa)	Etanol	Fermentación C6	$C_6H_{12}O_6 \rightarrow 2C_2H_5OH + 2CO_2$
Reacción 5	Hemicelulosa	Hem_P	Reacciones Ficticias que simulan las transformaciones estructurales de la materia prima (solubilización)	
Reacción 6	Celulosa	Cel_P		

Reacciones

Especies	
Nombre	Indice
<i>Hemicelulosa</i>	1
<i>Celulosa</i>	2
<i>Lignina</i>	3
<i>Etanol</i>	4
<i>Agua</i>	5
<i>Hemi_Pretrata</i>	6
<i>Celu_Pretrata</i>	7
<i>Dioxido de Carbono</i>	8

ANEXO H. Consideraciones y suposiciones del Caso en ejercicio

Es claro que hay tres índices principales en el planteamiento de este modelo:

- (i): Que denomina la capa a la que pertenece la variable o parámetro en cuestión.
- (e): Que denomina la especie a la que pertenece la variable o parámetro en cuestión.
- (o): Que denomina el operador al que pertenece la variable o parámetro en cuestión.

A partir de estas bases se generaron otras variables y parámetros derivados, como los siguientes:

- Para cada bloque, pareja (i, o): Temperatura promedio de operación o salida ($T_{i,o}$), Costo Fijo para una capacidad específica ($C_{Fix_{i,o}}$), Costo Operacional por Unidad de Flujo ($C_{op_{i,o}}$), Capacidad de referencia ($Capacidad_{i,o}$).
- Para cada especie en cada Bloque, trio (i, e, o): Factor limitante de Conversión ($Y_{i, e, o}$), Factor binario de existencia de reacción ($B_{i, o, r}$), y Coeficiente de Separación ($Y_{i, e, o}$). Los dos últimos son determinados por el usuario dependiendo de la forma en que se requiera simular lo que ocurre en cada bloque. Esto es, por ejemplo, si se quiere continuar procesando la fracción del flujo de salida en estado sólido, el coeficiente de separación representará esta fracción precisamente; o si una reacción se da en un bloque y en otro no, se asigna 1 y 0 respectivamente al parámetro de existencia de reacción.
- Para cada especie (e): Entalpías de formación estándar (h^0_e) a 298K y 1 atm, Pesos moleculares aproximados (PM_e) para el caso de los polímeros se trabajó con el peso del monómero, Coeficientes para las capacidades caloríficas (A_e, B_e, C_e, D_e), Precios (P_e).
- Coeficientes estequiométricos para cada compuesto o especie en cada reacción ($Coef_{e,r}$), siguiendo la convención de negativo para reactivo,

positivo para producto y cero para cuando se considera inerte en dicha reacción.

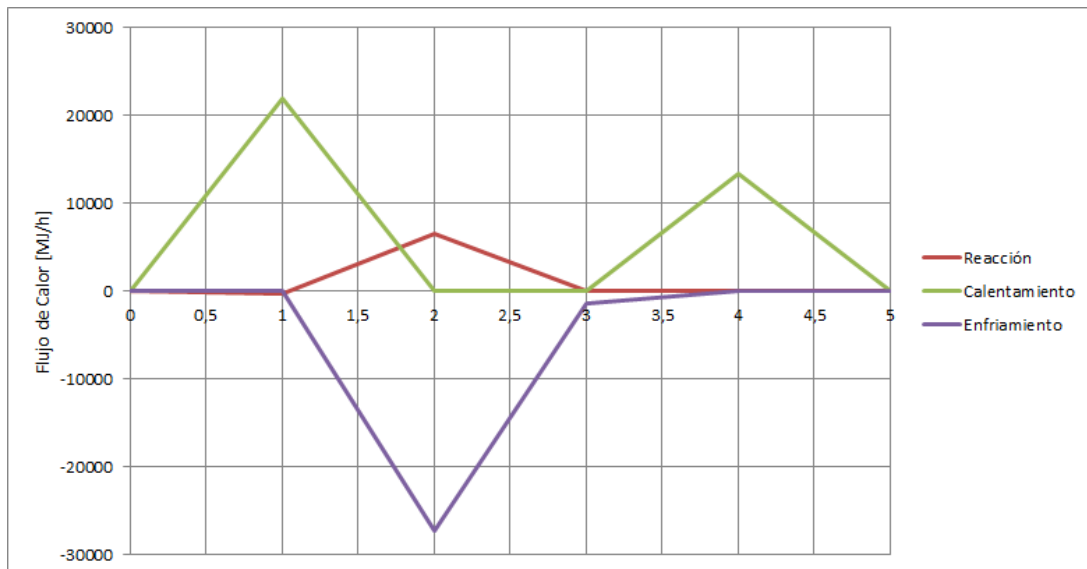
- Temperatura de referencia, Costo de enfriamiento y de calentamiento [\$/kJ], temperatura ambiente, temperatura de materia prima. La opción del tiempo de residencia y la capacidad volumétrica solo se utilizó para la capa de Pretratamientos, por lo tanto los datos referentes a esta solo se requirieron en dicha capa.

ANEXO I. Otras soluciones NO-Óptimas

Solución Alternativa 3

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	1	0	0
C2	0	0	1	0
C3	0	0	0	1
C4	0	0	1	0

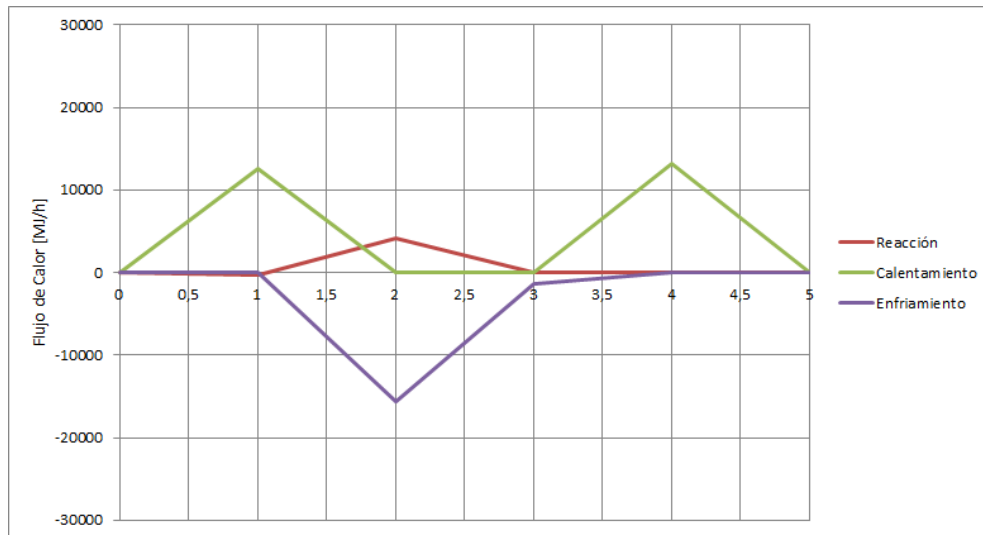
Valor Función Objetivo = 10465,33966 Millones de Dólares



Solución Alternativa 4

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	0	1	0	0
C2	0	1	0	0
C3	0	1	0	0
C4	0	0	1	0

Valor Función Objetivo = 9408,002221 Millones de Dólares



Solución Alternativa 5

Capas	Operadores			
	O1	O2	O3	O4
C1	1	0	0	0
C2	0	0	1	0
C3	0	0	0	1
C4	1	0	0	1

Valor Función Objetivo = 3032,376439 Millones de Dólares

