

Análisis Energético de Reactor Multifuncional de Pretratamiento Continuo de Biomasa
Lignocelulósica

Johana Lisbeth Jerez Pérez

Angie Paola Urrea Cañón

Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de Ingeniero Químico

Director

Viatcheslav Kafarov

Doctor en Ciencias Técnicas

Codirectora

Neila Milena Mantilla Barbosa

Doctora en Ingeniería Química

Tutores

Jorge Luis Chacón Velasco

Doctor en Procesos Termofluidodinámicos Aplicados a MCIA

Nilson Yulián Castillo León

Magister en Sistemas Energéticos Avanzados

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingeniería Físicoquímica

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2021

Dedicatoria

A Dios por guiarme en este proceso y permitirme llegar a este punto, a mis padres Carlos y Ayde por brindarme su compañía y buenos consejos, sin ellos nada de esto podría ser realidad, a mi abuelita Carmen por sus bonitas palabras y dulce compañía, a mi hermana Lorena por ser esa persona confidente que siempre me apoyo y a todas las personas con las que compartí esta etapa de la vida, de las cuales aprendí mucho y tendré gratos recuerdos.

Johana Lisbeth Jerez Pérez

A mis padres Omar y Mireya, por haberme forjado y enseñado que el arma más poderosa para cambiar el mundo es a través de la educación; muchos de mis logros se los debo a ustedes, que me han enseñado a persistir hasta alcanzar mis objetivos. A mi hermana y amigos por ser una constante fuente de motivación y me han apoyado a lo largo de mi crecimiento tanto personal como profesional.

Angie Paola Urrea Cañón

Agradecimientos

Agradecemos a nuestras familias por su comprensión y apoyo durante todo este proceso, a nuestra alma mater la Universidad Industrial de Santander y en especial la Escuela de Ingeniería Química por permitir nuestra formación académica de alta calidad.

A los docentes que dejaron una huella en nuestro camino, así como al Dr. Kafarov, al Dr. Jorge Chacón y especialmente a la Dra. Neila Mantilla por permitirnos conocer su arduo trabajo en su equipo de pretratamiento. A Nilson Yulián Castillo que fue nuestra guía a seguir en cada paso que hicimos durante el desarrollo del trabajo de investigación.

A nuestros amigos Carolina, Hancetel, José y Yesica con los cuales formamos una bonita amistad a lo largo de este proceso y de los cuales nos llevaremos lo mejor de cada uno de ellos.

Contenido

	Pág.
Introducción	11
1. Estado del Arte	13
2. Objetivos	17
2.1 Objetivo General	17
2.2 Objetivos Específicos	17
3. Descripción Metodológica	18
3.1 Fase 1 - Objetivo específico 1. Realización de una vigilancia tecnológica de evaluaciones energéticas a equipos similares.	18
3.2 Fase 2. Objetivo específico 2. Modelación etapa de pretratamiento mediante Aspen Plus.	20
3.3 Fase 3. Objetivo específico 3. Evaluación de la mejora en la eficiencia exergética por medio de variación de parámetros.	21
4. Resultados y Análisis de Resultados	22
4.1 Realización de vigilancia tecnológica sobre evaluaciones energéticas a equipos similares – Objetivo específico 1.	22
4.2 Modelación esquema de pretratamiento de biomasa lignocelulósica a través de Aspen Plus - Objetivo específico 2.	25
4.3 Evaluación de la mejora en la eficiencia exergética por medio de variación de parámetros – Objetivo específico 3.	36

5. Conclusiones43

6. Recomendaciones.....44

Referencia.....45

Apéndices49

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1. <i>Esquema del reactor multifuncional de pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica</i>	16
Figura 2. <i>Metodología detallada por etapas según objetivos propuestos</i>	18
Figura 3. <i>Diagrama de pretratamiento simulado en Aspen Plus</i>	35
Figura 4. <i>Variación de Temperatura y Flujo de Vapor en el Reactor de Pretratamiento</i>	42

Lista de Tablas

	Pág.
Tabla 1. <i>Publicaciones relevantes encontradas en la literatura</i>	23
Tabla 2. <i>Parámetros iniciales para ejecución de la simulación</i>	25
Tabla 3. <i>Caracterización de Bagazo de Caña de Azúcar proveniente de Incauca y caracterización de muestra estándar de Bagazo de Caña de Azúcar del NIST</i>	27
Tabla 4. <i>Composición del bagazo de caña de azúcar en base seca</i>	29
Tabla 5. <i>Condiciones operacionales del pretratamiento y reacciones del proceso</i>	30
Tabla 6. <i>Composición salida del reactor de pretratamiento en simulación Aspen Plus</i>	32
Tabla 7. <i>Equipos simulados del proceso en Aspen Plus</i>	33
Tabla 8. <i>Flujo de exergía total en todas las corrientes</i>	38
Tabla 9. <i>Trabajo de motores necesario de cada equipo</i>	39
Tabla 10. <i>Balances de exergía en los equipos</i>	40

Lista de Apéndice

Pág.

Apéndice A. Balance de masa pretratamiento biomasa lignocelulósica49

Resumen

Título: Análisis Energético de Reactor Multifuncional de Pretratamiento Continuo de Biomasa Lignocelulósica*

Autores: Johana Lisbeth Jerez Pérez y Angie Paola Urrea Cañón**

Palabras Claves: Materiales Lignocelulósicos, Pretratamiento, Análisis Exergético, Simulación, Eficiencia Exergética.

Descripción:

Los materiales lignocelulósicos actualmente son recursos energéticos prometedores para la producción de bioetanol. Sin embargo, la resistencia en su estructura química y física ha exaltado la importancia de analizar etapas de pretratamiento que mejoren la accesibilidad a los compuestos de la biomasa y mejorar así la eficiencia del proceso. En este trabajo, se evaluó la eficiencia exergética del reactor multifuncional para el pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica, que se compone de una etapa termoquímica y mecánica, a través del modelamiento del proceso en el simulador Aspen Plus. Para la base de datos de materiales lignocelulósicos requerida en el simulador, se utilizó la base proporcionada por el Laboratorio Nacional de Energías Renovables NREL, debido a que por sus complejas estructuras lignocelulósicas no se encuentran implícitamente en el software. En el cálculo de las exergías, se utilizó la metodología propuesta por Dincen y Rosen (2012), consta de siete pasos fundamentales que contribuyen a la estructuración del análisis exergético y de esta forma encontrar las pérdidas exergéticas.

La zona de pretratamiento termoquímico fue la que presentó mayor pérdida exergética, debido a que el suministro de vapor fue un dato no reportado experimentalmente, por tal motivo se escogió este volumen de control para variar los parámetros de temperatura y flujo de vapor. Esta variación tuvo la finalidad de aumentar la eficiencia del proceso encontrando un incremento del 0.81% lo que disminuyó el flujo de vapor a 291.702 ton/día equivalente a un 40% menos del valor de referencia y manteniendo la temperatura de referencia propuesta en 130°C, lo que influye positivamente en el ámbito energético.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingeniería Físicoquímica. Escuela de Ingeniería Química. Director: Viatcheslav Kafarov, Doctor en Ciencias Técnicas. Codirectora: Dra. Neila Milena Mantilla Barbosa, Doctora en Ingeniería Química. Tutores: Dr. Jorge Luis Chacón Velasco, Doctor en Procesos Termofluidodinámicos Aplicados a MCIA. Nilson Yulián Castillo León, Magíster en Sistemas Energéticos Avanzados

Abstract

Title: Energy Analysis of Lignocellulosic Biomass Continuous Pretreatment Multifunctional Reactor *

Authors: Johana Lisbeth Jerez Pérez and Angie Paola Urrea Cañón **

Keywords: Lignocellulosic Materials, Pretreatment, Exergetic Analysis, Simulation, Exergetic Efficiency.

Description:

Lignocellulosic materials are currently promising energy resources for bioethanol production. However, the resistance in its chemical and physical structure has exalted the importance of analyzing pretreatment stages that improve the accessibility to the biomass compounds and thus improve the efficiency of the process. In this work, the exergetic efficiency of the multifunctional reactor for the continuous pretreatment of lignocellulosic biomass, which is composed of a thermochemical and mechanical stage, was evaluated through the modeling of the process in the Aspen Plus simulator. For the database of lignocellulosic materials required in the simulator, the base provided by the National Renewable Energy Laboratory NREL was used, due to the fact that their complex lignocellulosic structures are not found implicitly in the software. In calculating the exergies, the methodology proposed by Dincen and Rosen (2012) was used, it consists of seven fundamental steps that contribute to the structuring of the exergy analysis and thus find the exergetic losses.

The thermochemical pretreatment zone was the one that presented the greatest exergetic loss, because the supply of steam was a data not reported experimentally, for this reason this control volume was chosen to vary the parameters of temperature and steam flow. This variation had the purpose of increasing the efficiency of the process, finding an increase of 0.81%, which decreased the steam flow to 291,702 tons / day, equivalent to 40% less than the reference value and maintaining the proposed reference temperature at 130 ° C., which positively influences the energy field.

* Degree work

** Faculty of Physicochemical Engineering, School of Chemical Engineering. Director: Viatcheslav Kafarov, Doctor of Technical Sciences. Co-director: Dra. Neila Milena Mantilla Barbosa, Doctor in Chemical Engineering. Tutors: Dr. Jorge Luis Chacón Velasco, Doctor in Thermofluidodynamic Processes Applied to MCIA. Nilson Yulián Castillo León, Master in Advanced Energy Systems

Introducción

Con el objetivo mundial de reducir la dependencia de los combustibles fósiles y salvar el medio ambiente, la investigación y el desarrollo están orientados actualmente a la producción de biocombustibles rentables, especialmente bioetanol, que se obtienen principalmente de biomasa lignocelulósica. (Ofori-Boateng & Lee, 2013). La oferta de energía primaria en Colombia está compuesta predominantemente por combustibles fósiles (carbón y petróleo), con una participación cercana al 77% del total mientras que la hidroelectricidad, el gas natural y las fuentes no convencionales de energía renovable (bagazo, biocombustibles y leña) suman el restante 23% (Unidad de Planeación Minero Energética (UPME), 2019). La biomasa es un recurso atractivo para la generación de energía, pues el cultivo con mayor generación de residuos agroindustriales en el país es el bagazo de caña de azúcar que tiene una producción anual de aproximadamente 6.1 millones t/año (Asocaña, 2019). Reducir la recalcitrancia del bagazo, es decir la matriz lignocelulósica, debe ser de una manera rentable y amigable con el ambiente; es un cuello de botella de las tecnologías de bioconversión y se conoce como etapa de pretratamiento (Osney, Antonio, & Geraldo, 2015), necesario para lograr la conversión eficiente de biomasa en biocombustibles y bioquímicos de alto valor agregado (Cherubini, 2010).

La Universidad Industrial de Santander en conjunto con Ecopetrol, desarrolló un proceso de pretratamiento que fue recientemente patentado por Mantilla Barbosa, (2018) junto con el reactor multifuncional de pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica (Mantilla, 2017). Este proceso presenta ventajas como menor severidad y altos rendimientos en la etapa de hidrólisis enzimática, lo que genera menores inhibidores para el proceso de producción de etanol, comparado con otros procesos de pretratamiento (Mahmood, Moniruzzaman, Iqbal, & Khan, 2019). Sin

embargo, el equipo de pretratamiento sigue en constante estudio con el objetivo de mejorar variables operacionales del proceso y aumentar la eficiencia del mismo.

En este estudio se realizó un análisis exergético así como variaciones de parámetros para poder dar respuesta a la siguiente pregunta de investigación planteada. ¿Qué variables en el proceso influyen positiva o negativamente en la eficiencia exergética del equipo de pretratamiento de biomasa lignocelulósica patentado por la UIS y ECOPETROL?

Este trabajo se realizó en tres fases: En la primera fase se realizó una revisión bibliográfica enfocada en la búsqueda de procesos de pretratamientos donde se realicen análisis exergéticos a escala industrial, para materiales lignocelulósicos que tengan afinidad con el equipo de pretratamiento de biomasa; posteriormente se simuló en Aspen Plus el proceso de impregnación y pretratamiento de la biomasa lignocelulósica con el fin de obtener las variables necesarias para el análisis exergético. Por último, se definió cuál equipo generó la mayor exergía destruida y así realizar una variación de parámetros para encontrar la mejor eficiencia exergética del proceso.

1. Estado del Arte

El proceso de pretratamiento descompone la estructura de la lignina, elimina la hemicelulosa, reduce la cristalinidad de la celulosa y aumenta el área de superficie accesible para permitir la acción de enzimas y microorganismos (Solarte-Toro, y otros, 2019). Existen adelantos utilizando diferentes métodos de pretratamiento, sin embargo, sólo se conoce que el equipo POET/DSM, declaró que encontró una manera efectiva y viable de pretratamiento a escala comercial (Slupska & Bushong, 2019), sin embargo, se desconoce qué tipo de pretratamiento fue desarrollado.

Los pretratamientos combinados han sido sugeridos por varios autores, pues muestran un panorama prometedor con ventajas en puntos de vista técnicos, económicos y sostenibles, debido a que no sólo mejoran la digestibilidad de los materiales lignocelulósicos, sino que también facilitan la recuperación de lignina y hemicelulosa para la producción de productos de alto valor, que muestran un gran potencial para la aplicación a gran escala (Sun, Cao, & Sun, 2016).

Chuetor, Champreda y Laosiripojana (2019), desarrollaron una combinación de pretratamiento químico-mecánico de biomasa lignocelulósica, con el objetivo de evaluar y optimizar la eficiencia energética. El bagazo se pretrató químicamente con una mezcla de hidróxido de sodio y peróxido alcalino durante tres horas haciendo diferentes pruebas, modificando la relación molar para encontrar la adecuada, seguido de un tratamiento mecánico, reducción de tamaño e hidrólisis enzimática. El pretratamiento químico-mecánico semihúmedo se encontró como el pretratamiento más efectivo al disminuir el 65% de consumo total de energía.

Por otro lado, Ojeda, Sánchez, El-Halwagi, y Kafarov (2011), realizaron un análisis de energía y exergía junto con metodologías de integración de procesos con la ayuda del simulador

Aspen Plus, en donde evaluaron diferentes configuraciones: hidrólisis-fermentación secuenciales, sacarificación-fermentación simultáneas y por último sacarificación-co-fermentación simultáneas. Todos los casos fueron sometidos a un pretratamiento con ácido sulfúrico diluido, debido a que los autores afirman que es un procedimiento crucial para asegurar buenos rendimientos finales, pues sin un pretratamiento previo, los rendimientos rondan en un 20%, mientras que tratando la biomasa se pueden alcanzar rendimientos cercanos al 90%. Finalmente, después de calcular la eficiencia exergética para cada caso, concluyeron que la sacarificación y co-fermentación simultáneas tuvieron una eficiencia exergética del 51.35% siendo la mejor de los tres casos expuestos. Destacan que las eficiencias pueden mejorar minimizando las pérdidas de exergía a través de mejoras en los equipos o en las corrientes de trabajo para una mejor utilización de la energía.

Hay casos puntuales donde sólo se estudia la etapa de pretratamiento; en este caso Silva y Oliveira (2014) evaluaron cuatro escenarios: a) Explosión de vapor b) Organosolv c) Agua líquida caliente y d) Organosolv y agua líquida caliente. Para cada caso se realizó una simulación en Aspen Plus tomando valores de las propiedades lignocelulósicas propuestas por el NREL Laboratorio Nacional de Energías Renovables. Después de analizar los datos de la simulación calcularon la eficiencia exergética para cada caso, dando como resultado: a) 93.2% b) 85.4% c) 94.1% d) 95.1% además de determinar la exergía destruida en cada caso. El escenario con mayor exergía y menor porcentaje de destrucción de la misma es la combinación de la explosión de vapor y el agua líquida caliente. Se ha evidenciado que al combinar pretratamientos el porcentaje de azúcares aumentan y las eficiencias energéticas mejoran.

Silva y Oliveira (2016), continuaron con la misma línea de investigación, debido a que plantearon los mismos escenarios de pretratamiento, esta vez añadiendo la fase de hidrólisis. Evaluaron la hidrólisis-fermentación por separado e hidrólisis-fermentación simultáneas en Aspen

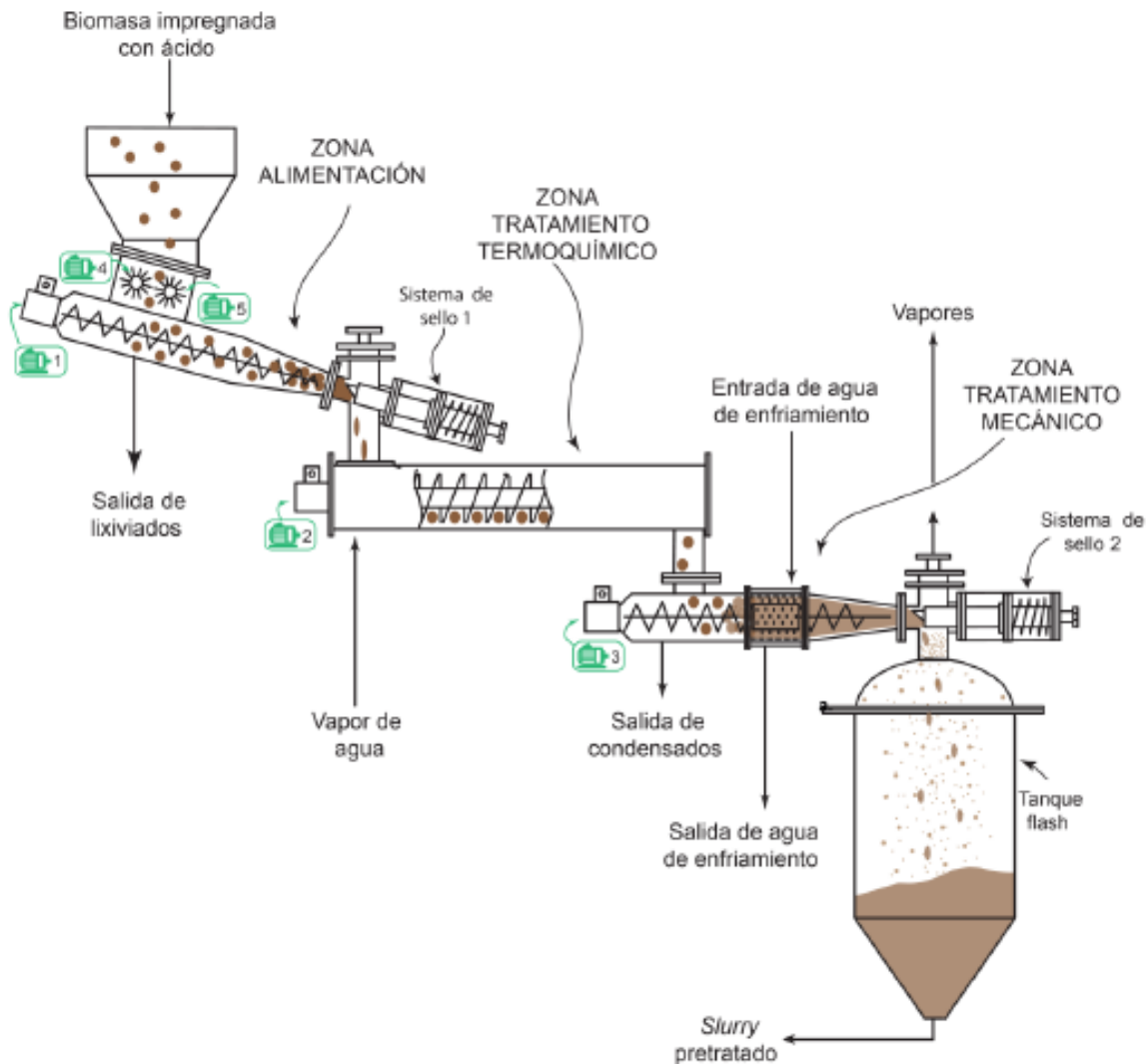
Plus, encontrando que la mejor eficiencia exergética de 60.3% es con la hidrólisis- fermentación separadas utilizando como método de pretratamiento Organosolv.

Debido a la variedad de materiales lignocelulósicos, no solo se realizan estudios del bagazo de caña de azúcar, por ejemplo, Ofori-Boateng y Lee (2013), realizaron una evaluación comparativa de tres casos de pretratamiento: Explosión de vapor, Organosolv y pretratamientos microbianos partiendo desde la hoja de palma aceitera. Para este tipo de biomasa, la mayor eficiencia exergética fue para los pretratamientos microbianos (90.93%) además de determinar que los principales contribuyentes a la destrucción de la exergía son los equipos de transferencia y separación de calor como las secadoras y centrifugadoras.

Mantilla Barbosa (2017) patentó un equipo el cual es objetivo de estudio; consta de tres tipos de pretratamiento en continuo. La biomasa es impregnada con ácido sulfúrico diluido antes de ingresar al proceso de pretratamiento con la finalidad de facilitar la difusión y mezclado uniforme del catalizador ácido en la biomasa lignocelulósica. Luego de tener la biomasa impregnada, como se evidencia en la Figura 1, la biomasa es alimentada al sistema donde aumenta el porcentaje de sólidos de 20-25% hasta un rango de 40% -70% de sólidos mediante la extracción de la solución residual por medio de la compresión de la biomasa. Seguidamente, se ingresa a una etapa de tratamiento termoquímico, en la que la biomasa impregnada previamente se mezcla con vapor saturado en un tiempo de 1 a 10 min, en este subproceso, se lleva a cabo el cambio en la composición de la biomasa, solubilizando parte de la hemicelulosa, lo cual debilita la estructura lignocelulósica, mejorando la accesibilidad enzimática. En la etapa de pretratamiento mecánico, las fibras se someten a un proceso de compresión y de molienda por medio de un rodillo dentado, disminuyendo el tamaño y contribuyendo aún más al incremento del área superficial accesible para las enzimas.

Figura 1.

Esquema del reactor multifuncional de pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica



Nota: Adaptado de Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar.* Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga

2. Objetivos

2.1 Objetivo General

Evaluar la eficiencia exergética del reactor multifuncional para el pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica.

2.2 Objetivos Específicos

Realizar una vigilancia tecnológica de evaluaciones exergéticas realizadas a dispositivos y configuraciones similares al reactor de pretratamiento de biomasa lignocelulósica.

Modelar el esquema de la etapa de pretratamiento mediante Aspen Plus, determinando los parámetros y variables del proceso.

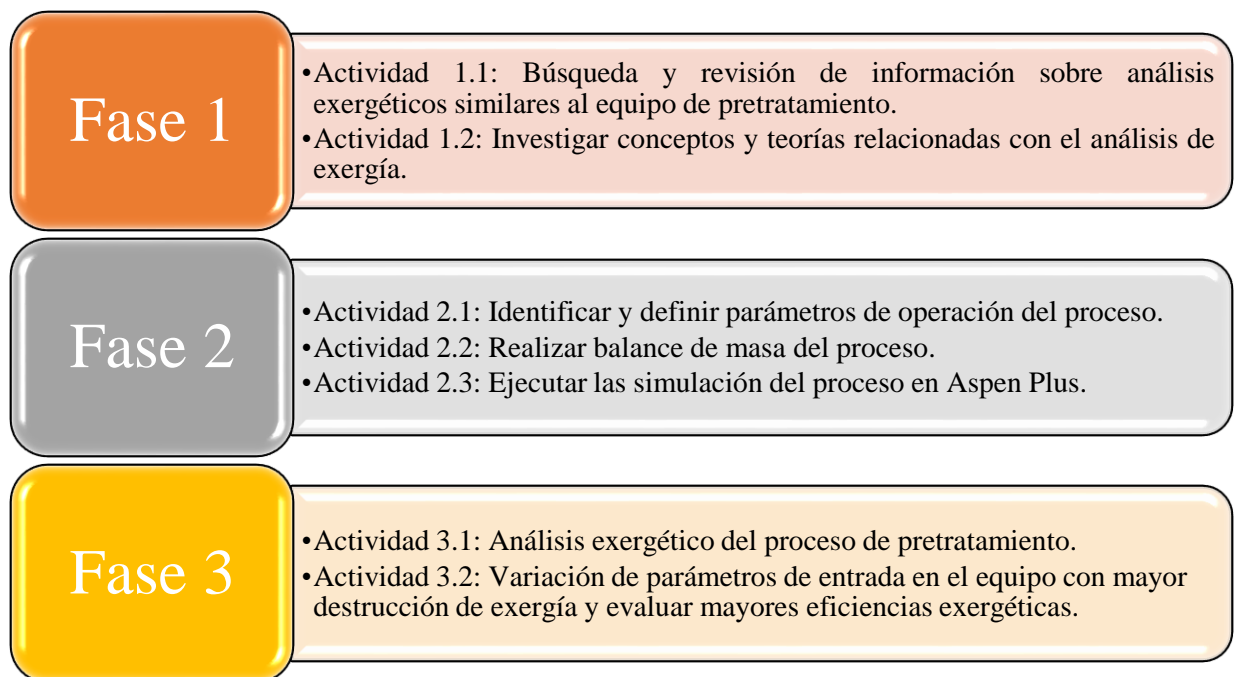
Evaluar la mejora de la eficiencia exergética a partir de la variación de parámetros en los equipos con mayor destrucción de exergía.

3. Descripción Metodológica

La metodología está definida por tres fases que permitan dar cumplimiento a los objetivos propuestos en el presente trabajo.

Figura 2.

Metodología detallada por etapas según objetivos propuestos.



3.1 Fase 1 - Objetivo específico 1. Realización de una vigilancia tecnológica de evaluaciones energéticas a equipos similares.

Actividad 1.1. Búsqueda y revisión de información sobre análisis exergéticos similares al equipo de pretratamiento.

Teniendo en cuenta la base de datos electrónica de la Universidad Industrial de Santander, se procedió a la búsqueda de información sobre procesos similares al caso de estudio. Para la elección de los diversos artículos relacionados en las bases electrónicas, se tuvieron en cuenta criterios específicos como:

- Compuestos de biomasa con características lignocelulósicas
- Procesos de impregnación de la biomasa con ácido sulfúrico diluido y pretratamientos fisicoquímicos de biomasa lignocelulósica.
- Artículos de pretratamientos que involucren inyecciones de vapor al material lignocelulósico.
- Simulaciones a escala industrial realizadas en Aspen Plus sobre pretratamientos de biomasa lignocelulósica.

Para la realización de la vigilancia tecnológica, se revisaron bases de datos electrónicas con publicaciones científicas que abordan diversas áreas como ciencias, tecnología e ingeniería tales como Science Direct, SciFinder y ACS (American Chemical Society).

La manera más usual para la búsqueda de información es con palabras clave, pues son la llave de entrada a la búsqueda de documentos en donde estas palabras estén ubicadas en el texto. Luego de revisar las palabras clave, se formuló la ecuación de búsqueda.

Actividad 1.2. Investigar conceptos y teorías relacionadas con el análisis de exergía.

El análisis exergético es una técnica de análisis termodinámico basada en la segunda ley de la termodinámica, que proporciona un medio alternativo y esclarecedor para evaluar y comparar

procesos y sistemas de manera racional y significativa. (Dincer & Rosen, 2012). En este estudio, se siguió la metodología propuesta por Dincer & Rosen (2012), la cual recomienda el seguimiento de los siguientes pasos:

1. Subdividir el proceso que se está considerando en las secciones deseadas.
2. Realizar balances convencionales de masa y energía en el proceso, determinando todas las cantidades básicas (por ejemplo, trabajo, calor) y propiedades (por ejemplo, temperatura, presión).
3. Seleccionar un modelo de entorno de referencia, con base en la naturaleza del proceso.
4. Evaluar los valores de exergía, con relación al modelo de entorno de referencia seleccionado.
5. Realizar balances de exergía, incluida la determinación de consumos de energía.
6. Evaluar los valores de las eficiencias basados en los cálculos realizados.
7. Analizar los resultados, realizando conclusiones y recomendaciones adecuadas, relacionadas con cuestiones tales como cambios de diseño, modificaciones de la planta de reacondicionamiento, etc.

3.2 Fase 2. Objetivo específico 2. Modelación etapa de pretratamiento mediante Aspen Plus.

Actividad 2.1. Identificar y definir parámetros de operación del proceso.

Los parámetros operacionales necesarios para ejecutar la simulación en el software Aspen Plus del proceso de pretratamiento, se encontraron en la literatura de trabajos similares previamente realizados.

Actividad 2.2. Realizar balance de masa del proceso.

Para obtener los datos que se ingresan al simulador, previamente se realizó un balance de masa en dos fases: en primer lugar, están los equipos de reactor de impregnación, prensado y reactor de alimentación. La segunda etapa corresponde a los equipos de reactor de pretratamiento, chaqueta de enfriamiento y tanque flash. (Ver Apéndice A)

Actividad 2.3. Ejecutar la simulación del proceso en Aspen Plus.

Para la correcta ejecución de la simulación, se utilizó la base de componentes realizada por el NREL, debido a que los compuestos utilizados no se encuentran en la base de datos de Aspen Plus a causa de su compleja estructura molecular. Al tomar la base de componentes se realizó un ajuste acorde al proceso de pretratamiento en estudio, pues la base del NREL es de todo el proceso productivo del bioetanol. Inicialmente, se escogieron los equipos a utilizar en la simulación teniendo en cuenta la similitud con los equipos del pretratamiento de Mantilla (2017), seguido se ingresan las corrientes principales como el bagazo, el agua y el ácido sulfúrico, ajustando las condiciones operacionales para cada equipo, así como las reacciones en los reactores del proceso. Finalmente, se ejecutó la simulación para analizar los resultados.

3.3 Fase 3. Objetivo específico 3. Evaluación de la mejora en la eficiencia exergética por medio de variación de parámetros.

Actividad 3.1. Análisis exergético del proceso de pretratamiento.

Las variables termodinámicas fueron obtenidas por el simulador Aspen Plus para calcular los flujos de exergía de cada corriente dentro del proceso. Luego de hallar los flujos exergéticos, se realizó un balance de masa y exergía con el cual se calculó la destrucción de exergía para cada equipo.

Actividad 3.2. Variación de parámetros de entrada en el equipo con mayor destrucción de exergía y evaluar mayores eficiencias exergéticas.

Para poder estimar una mejora en el proceso de pretratamiento de biomasa lignocelulósica se realizó un análisis de sensibilidad de forma local, donde se determinan los parámetros que más influyen en el comportamiento de un modelo y por ende ser candidatos de estudio (Garduño García et.al., 2014), se analiza la varianza de las funciones de salida con respecto a los parámetros de entrada. Estos parámetros son alterados dentro de un intervalo pequeño, alrededor de un valor nominal.

Se identificó el equipo que presentó el mayor porcentaje de exergía destruida, en este caso el reactor de pretratamiento y en consecuencia, se escogieron los parámetros de temperatura y flujo de vapor para modificarlos con el fin de estimar un mayor rendimiento exergético.

4. Resultados y Análisis de Resultados

4.1 Realización de vigilancia tecnológica sobre evaluaciones energéticas a equipos similares –

Objetivo específico 1.

La ecuación de búsqueda es la combinación de palabras clave y de operadores booleanos para expresar una necesidad de información. Para este caso se utilizaron las siguientes ecuaciones de búsqueda: “Exergy Analysis AND Pretreatment biomass AND 2020 AND Aspen Plus”, “Exergy analysis OR bagasse pretreatment AND sugar cane bagasse” “Exergy analysis NOT exergo-economic análisis AND lignocellulosic material”, por ejemplo para la primera ecuación de búsqueda siendo la más completa, se encontrando 115 resultados, los cuales se filtraron por medio

de Scimago, una plataforma que provee diversos indicadores sobre la veracidad y el impacto de revistas a partir de información de Scopus y Elsevier.

Como resultado las ecuaciones de búsqueda y la implementación de Scimago se obtuvieron las publicaciones mostradas en la Tabla 1.

Tabla 1.

Publicaciones relevantes encontradas en la literatura.

Título	Tipo Pretratamiento	Biomasa Utilizada	Referencia
Análisis de exergía e integración de procesos de producción de bioetanol a partir de biomasa pretratada con ácido: comparación de las vías de SHF, SSF y SSCF	Ácido sulfúrico diluido	Bagazo de caña de azúcar	(Ojeda, Sánchez, El-Halwagi, & Kafarov, 2011)
Evaluación comparativa de la sostenibilidad termodinámica de los métodos de pretratamiento lignocelulósicos para la producción de bioetanol mediante análisis de exergía	Explosión de vapor, Organosolv y pretratamientos microbianos	Hojas de palma aceitera	(Boateng & Lee, 2013)
Análisis exergético de procesos de pretratamiento de producción de bioetanol a base de bagazo de caña de azúcar	Explosión de vapor, Organosolv y agua líquida caliente	Bagazo de caña de azúcar	(Silva & Oliveira, 2014)

Tabla 1. *Continuación*

Título	Tipo Pretratamiento	Biomasa Utilizada	Referencia
Comparación de hidrólisis fermentación secuencial y sacarificación fermentación simultáneas mediante análisis de exergía	Explosión de vapor, Organosolv, agua líquida caliente	Bagazo de caña de azúcar	(Silva & Oliveira, 2016)
Proceso de producción de bioetanol a través del pretratamiento de explosión de vapor catalizado: Un análisis de ejercicio asistido por computadora e integración de calor	Explosión de vapor	Bagazo de caña de azúcar	(Delgado et.al, 2018)
Análisis exergético en producción de bioetanol a partir de residuos de arroz	Ácido sulfúrico diluido	Residuos de arroz	(Hurtado et.al, 2018)
Evaluación del pretratamiento quimicomecánico semihúmedo de biomasa lignocelulósica en eficiencia energética y generación de residuos	Pretratamiento combinado alcalino con Hidróxido de sodio seguido de una molienda	Bagazo de caña de azúcar	(Chuetor, Champreda, & Laosiripojana, 2019)
Pretratamiento con agua caliente de biomasa lignocelulósica: modelado de los efectos de las cargas de temperatura, enzimas y biomasa en el rendimiento de azúcar	Agua líquida caliente	Bagazo de caña de azúcar	(Wells et.al, 2020)

En medio de la búsqueda se pudo concluir que actualmente es un tema de interés en el ámbito científico. Las publicaciones asociadas con estudios exergéticos y simulaciones en Aspen Plus para procesos de pretratamiento han sido poco estudiadas; en las publicaciones encontradas

abarcan un proceso en general de producción de bioetanol. Silva & Oliveira (2014) poseen publicaciones relacionadas con el alcance del trabajo, enfocando sus estudios en escenarios de pretratamiento, además de realizar las simulaciones en Aspen Plus, siendo referente y guía para la realización de este estudio.

4.2 Modelación esquema de pretratamiento de biomasa lignocelulósica a través de Aspen Plus

- Objetivo específico 2.

Para iniciar la simulación, el software solicita parámetros iniciales como se evidencian en la Tabla. En los parámetros requeridos, se debe conocer la caracterización de la materia prima, por lo que fue necesario revisar la patente de Mantilla Barbosa (2017), allí se evidencian la composición del bagazo y demás requerimientos necesarios para la simulación como temperaturas, porcentajes de sólidos, entre otros. El entorno de referencia para este estudio fue de una temperatura de 25 °C y presión de 1 atm, estos parámetros fueron necesarios para ingresar las corrientes de entrada en el software.

Tabla 2.

Parámetros iniciales para ejecución de la simulación.

Parámetro	Valor	Unidades	Referencia
Flujo de bagazo	1000	ton/día	(Mantilla Barbosa, 2017)
Flujo de ácido	46.49	ton/día	(Mantilla Barbosa, 2017)
Flujo de agua	3953.51	ton/día	(Mantilla Barbosa, 2017)
Flujo de vapor	486.17	ton/día	Silva & Oliveira, 2014
% Sólidos totales en E	10	%	(Mantilla Barbosa, 2017)
% Sólidos totales en F	25	%	(Mantilla Barbosa, 2017)

Tabla 2. *Continuación*

Parámetro	Valor	Unidades	Referencia
% Sólidos totales en H	50	%	(Mantilla Barbosa, 2017)
Temperatura E-101	60	°C	(Mantilla Barbosa, 2017)
Temperatura en P	40	°C	Acuña & Contreras, 2017
Temperatura R-101	80	°C	(Mantilla Barbosa, 2017)
Presión R-101	1	Atm	(Mantilla Barbosa, 2017)
Temperatura R-102	130	°C	(Mantilla Barbosa, 2017)
Presión R-102	1.67	Atm	(Mantilla Barbosa, 2017)

Nota: Adaptado de Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar. Bucaramanga:* Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga; Acuña Barragán, F. G., & Contreras Navas, Ó. (2017). *Análisis tecnoeconómico del proceso de producción de etanol, implementando un pretratamiento termomecánico con ácido sulfúrico diluido y su comparación con el caso base del NREL. U. Bucaramanga, Colombia:* Universidad Industrial de Santander

El bagazo fue donado por INCAUCA S.A.S, empresa agroindustrial dedicada al cultivo y procesamiento de la caña de azúcar para la obtención de azúcares y producción de alcohol carburante. Para tener un punto de referencia, los datos fueron comparados con una muestra estándar de Bagazo de caña de Azúcar del Instituto Nacional de estándares y Tecnología de los Estados Unidos, (National Institute Standards & Technology, NIST, 2011) que fue originalmente caracterizada en conjunto con la Agencia Internacional de Energía (IEA), NREL y NIST. (Mantilla Barbosa, 2017)

En la comparación estimada en la Tabla 3 se evidencia que los resultados obtenidos por Mantilla Barbosa (2017) en el laboratorio difieren principalmente en cuanto al contenido de glucosa y lignina, sin embargo, la mayoría de los valores son cercanos a los proporcionados por el NIST, lo cual genera confiabilidad en los datos de caracterización obtenidos.

Tabla 3.

Caracterización de Bagazo de Caña de Azúcar proveniente de Incauca y caracterización de muestra estándar de Bagazo de Caña de Azúcar del NIST.

Descripción	BCA Incauca		NIST- 8491	
	Fracción másica (%*)	σ	Fracción másica (%*)	Incertidumbre expandida (%)
Extractivos en agua	4.40	0.04	4.10	1.00
Extractivos en etanol 95% (Después de extracción en agua)	1.36	0.12	1.79	0.21
Sacarosa	No detectado	-	0.10	0.03
Cenizas Totales	5.24	0.03	3.84	0.26
Cenizas libres de extractivos♣	2.88	0.39	3.45	0.16
Glucano	35.32	1.61	40.50	1.40
Xilano	21.40	0.15	22.04	0.94
Arabinano	1.81	0.11	1.49	0.33
Galactano	No detectado	-	0.28	0.33
Manano	No detectado	-	0.00	0.45
Azúcares estructurales♣	58.53	1.62	65.56	0.96
Lignina Total	21.27	0.70	24.40	1.30
Lignina soluble en ácido♣	2.73	0.02	2.40	1.60
Lignina Insoluble en ácido♣	18.55	0.07	No reportado	-

Tabla 3. *Continuación*

Descripción	BCA Incauca		NIST- 8491	
	Fracción másica (%*)	σ	Fracción másica (%*)	Incertidumbre expandida (%)
Residuo ácido insoluble♣	21.84	0.12	20.90	1.70
Grupos acetilo	4.69	0.27	3.19	0.81
Nitrógeno	No determinado	-	0.21	0.10
Cierre del balance de masa	95.50	1.79	101.56	1.80

*g de componente /g BCAo, σ Desviación Estándar, U Incertidumbre Expandida, ♣No se tienen en cuenta para el cierre del balance de masa.

Nota: Adaptado de Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar*. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga

En la definición de la capacidad de la planta, se utilizó como referencia el resultado de estudios del NREL y Ecopetrol, donde concluyeron que, para un proceso de generación de bioetanol económicamente viable en Colombia, se debe garantizar un tamaño de planta superior a 800 ton húmedas/día y costo de biomasa inferior a 35 USD/ton, para el caso colombiano (Mantilla Barbosa, 2017). Para este trabajo se decidió utilizar una capacidad de 1000 ton húmedas/días equivalentes a 500 toneladas/día en base seca, distribuidas en los distintos compuestos lignocelulósicos evidenciados en Tabla 4. Se tuvo en cuenta que el contenido de humedad del bagazo de caña en los ingenios azucareros es del 50% (Kumar, 2019).

Tabla 4.

Composición del bagazo de caña de azúcar en base seca.

Compuesto bagazo de caña de azúcar en base seca		Flujo (Ton/día)	%
	Cenizas	27.45	5.49
	Celulosa	184.95	36.99
Sólidos Insolubles (SI)	Xilano	112.05	22.41
	Arabinano	9.50	1.90
	Lignina	111.35	22.27
	Acetato	24.55	4.91
Sólidos Solubles (SS)	Extractivos	30.15	6.03
	Productos	0.00	
		500.00	100

Nota: Adaptado de Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar.* Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga;

La simulación realizada en Aspen Plus es necesaria para calcular las propiedades termodinámicas como entalpía, entropía y fracciones molares del proceso y así poder realizar el análisis exergético. Inicialmente, se ingresan a la etapa de impregnación las corrientes de entrada (bagazo de caña, agua y ácido sulfúrico), haciendo los respectivos cálculos para ingresar el flujo másico de cada compuesto (Ver Figura 3, corrientes A, B y C). El respectivo balance se aprecia en el Apéndice A.

Antes del pretratamiento es necesaria una etapa de impregnación con ácido sulfúrico diluido que genere una difusión del ácido a través de las porosidades de la estructura del bagazo, facilitando el fraccionamiento de la matriz lignocelulósica en la etapa posterior de pretratamiento. Previamente

se deben mezclar 46.49 ton/día de ácido sulfúrico comercial al 98% con 3953.51 ton/día de agua para lograr una concentración del 1.14% (g ácido/g líquido) en el mezclador M-101, posteriormente se adiciona el bagazo de caña al reactor R-101 tomando un tiempo de residencia de 2 horas a 80°C, con un 10% de sólidos totales. Cabe aclarar que los sólidos totales son la suma de los sólidos solubles más los sólidos insolubles. Los cálculos de la etapa de impregnación se describen en el Apéndice A.

Aspen Plus cuenta con tres clases de modelos, con diferentes niveles de rigor y capacidad predictiva; modelos de balance de masa y energía, modelos en equilibrio y modelos de cinética rigurosa; en este caso se escogió el primer modelo en el cual se encuentran los reactores Rstoic y RYield. Se seleccionó Rstoic debido a que se conoce la estequiometría de las reacciones, así como las conversiones para cada una, proporcionadas por Mantilla Barbosa (2017). Como se evidencia en la Tabla 5, las conversiones son bajas en R-101 pues sólo es una impregnación que ayudará a desestabilizar las estructuras lignocelulósicas y aumentar la conversión en R-102.

Tabla 5.

Condiciones operacionales del pretratamiento y reacciones del proceso.

Condiciones	R-101	R-102
Temperatura	80°C	130°C
Presión	1 atm	1.67 atm
Reacciones	Conversiones	
(Glucano) n + n H ₂ O → n Glucosa	X = 0.065 %	X = 0.2 %
(Glucano) n + n H ₂ O → n Glucosaolig	X = 3.48 %	X = 2.5 %
(Xylano) n + n H ₂ O → n Xylosa	X = 0.62 %	X = 11.8 %
(Xylano) n + n H ₂ O → n Xylosaolig	X = 8.7 %	X = 28.8 %

Tabla 5. *Continuación*

Condiciones	R-101	R-102
Reacciones	Conversiones	
$(\text{Arabinano})_n + n \text{H}_2\text{O} \rightarrow n \text{Arabinosa}$	X = 3.45 %	X = 9.2 %
$(\text{Xylano})_n \rightarrow n \text{Furfural} + 2n \text{H}_2\text{O}$	-	X = 0.2 %
Grupos acetilo \rightarrow Ácido acético	X = 21.5 %	X = 73.4 %

Nota: Adaptado de Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar.* Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga;

Luego de la impregnación, es necesario depurar la cantidad de mezcla líquida en la biomasa (agua, ácido, sólidos solubles) por lo que se somete a un proceso de prensado en el equipo S-101 dejando un 25% de sólidos totales. Este procedimiento de impregnación es un proceso por lotes, por lo que la biomasa no ingresa inmediatamente a la siguiente etapa y se enfría luego del prensado por aireación. En la simulación se utiliza un enfriador E-101 para que la biomasa ingrese a 60°C al reactor de alimentación el cual cuenta con un sistema de “rodillos dentados” que prensan la biomasa depurando lixiviados (sólidos insolubles, agua y ácido). Este sistema de depuración está en la simulación como S-102; en esta sección el porcentaje de sólidos totales aumenta a un 50%.

La biomasa ingresa a un proceso termoquímico en el reactor R-102, debido a que interactúa con un flujo de vapor que se puede encontrar en el rango de 0.55 – 0.65 kg de vapor/ kg de bagazo húmedo (Silva & Oliveira, 2014), a una temperatura de 130°C y presión de 1.67 atm. El flujo de vapor tiene dos funciones principales en el equipo: Cerca del 90% del vapor interactúa con la biomasa mientras que el 10% restante cumple la función de calentar parte del reactor termoquímico, por lo cual, en los balances de masa correspondientes sólo se trabajó con el 90% del flujo de vapor (Ver Apéndice B). En R-102 las conversiones son más altas como se evidencia en la Tabla 5, debido a que el vapor permite la degradación de la hemicelulosa, la transformación

de la lignina da como resultado una mayor cristalinidad de la celulosa ya que el proceso facilita la cristalización de las partes amorfas de la biomasa (Ofori-Boateng & Lee, 2013). Luego de que el vapor cumple su función al entrar en contacto con la biomasa, se evacúa junto con un porcentaje de sólidos insolubles por medio de un condensador.

Tabla 6.

Composición salida del reactor de pretratamiento en simulación Aspen Plus

Corriente K	Compuesto	Ton/día
	Celulosa	173.58
	Xilano	60.15
Sólidos	Arabinano	5.65
Insolubles	Lignina	111.35
SI	Acetato	5.13
	Cenizas	27.45
	Extractivos	3.02
	Glucosa	0.41
	Xilosa	13.70
Sólidos	Arabinosa	1.02
Solubles	Ácido Acético	14.67
SS	Furfural	0.15
	Glucosa Olig	5.10
	Xilosa Olig	30.24

Debido a que la biomasa está en constante molienda por un sistema de carcaza fija y eje rotatorio dentado, con el fin de evitar la elevación de temperatura y la degradación de los azúcares producidos que se evidencian en la Tabla 6, es necesario mantener una temperatura estable, por lo tanto, el equipo debe contar con un sistema de enfriamiento; por medio de una chaqueta que lo rodea para cumplir tal fin. Al sistema de enfriamiento E-102 ingresan 3500 ton/día de agua a temperatura y presión ambiente (25 °C y 1 atm) y abandona la molienda a 40°C respectivamente, manteniendo la biomasa a una temperatura de 80°C. Finalmente, la biomasa pasa a un sistema de separación flash T-101 que se divide en dos corrientes (Q y R), una que evacua vapores y la otra que contiene la biomasa pretratada con un valor de 531.50 ton/día.

La Tabla 7 muestra los equipos implementados en este estudio, en el simulador Aspen Plus, estos equipos a la vez se encuentran referenciados en el diagrama de proceso (ver Figura 3)

Tabla 7.

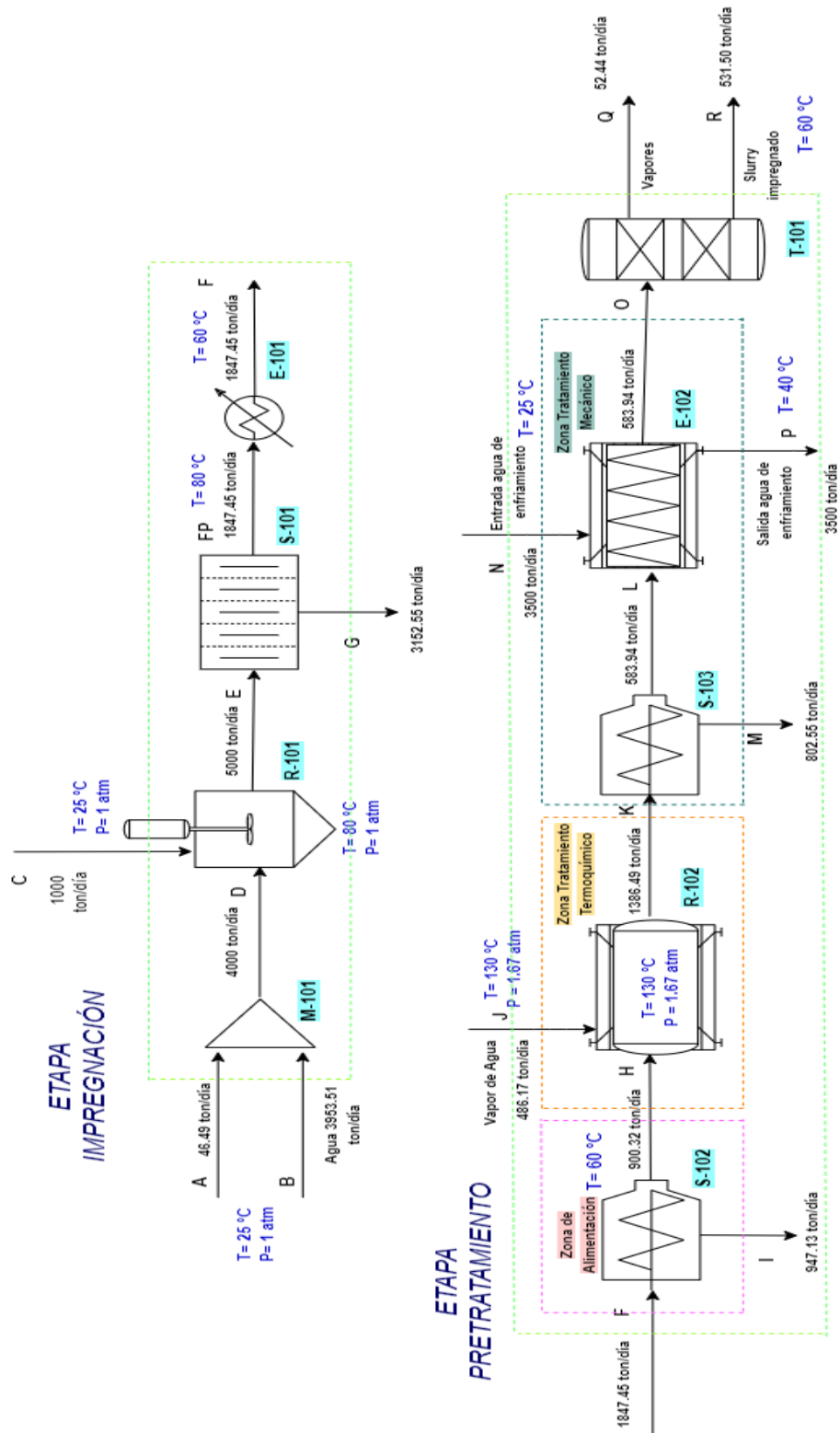
Equipos simulados del proceso en Aspen Plus.

Abreviación	Equipo
M-101	Mezcladora
R-101	Reactor de impregnación
S-101	Prensadora
E-101	Intercambiador de calor
S-102	Equipo de alimentación
R-102	Reactor de alimentación
S-103	Prensador II
E-102	Equipo de enfriamiento
T-101	Torre flash

Para ejecutar la simulación se buscaron equipos que cumplieran las funciones de las tres zonas del equipo de pretratamiento y la etapa de impregnación, como se evidencia en la Figura 1, en la Tabla 7 se encuentran los equipos que conforman cada parte de las zonas del reactor de pretratamiento continuo de biomasa lignocelulósica, por ejemplo la etapa de impregnación está en color verde, la zona de alimentación en color rosado, la zona termoquímica en amarillo y por último la zona de tratamiento mecánico en gris.

Figura 3.

Diagrama de pretratamiento simulado en Aspen Plus.



4.3 Evaluación de la mejora en la eficiencia exergética por medio de variación de parámetros

– Objetivo específico 3.

Para estimar los valores de exergía se comenzó con el cálculo de la exergía química y física para cada corriente del proceso. En el cálculo de la exergía química se usaron las fracciones molares de cada corriente dadas por el simulador; también fue necesario consultar las exergías químicas específicas de cada compuesto (Vásquez Ruiz, 2014). La exergía física se calculó con datos de entalpía y entropía de las corrientes proporcionadas por el simulador. Finalmente, se suman la exergía química y física.

Para el cálculo de la exergía total se debe aplicar la siguiente ecuación.

$$e = e_{ph} + e_{ch} + e_{ke} + e_{pe} \quad (\text{Ec. 1})$$

Donde

e_{ph} = Exergía física (kJ/kg)

e_{ch} = Exergía química (kJ/kg)

e_{ke} = Exergía cinética (kJ/kg)

e_{pe} = Exergía potencial (kJ/kg)

Exergía física

La exergía física se calcula mediante la siguiente ecuación

$$e_{ph} = \frac{\sum x_i \cdot (h - h_0) - T_0 \cdot (\sum x_i \cdot (s - s_0) - R \cdot \ln \left(\frac{P_{GT}}{P_{atm}} \right))}{\sum P_{es} x_i \cdot y_i} \quad (\text{Ec. 2})$$

Donde h_0 (kJ/kmol), s_0 (kJ/kmol.K) y T_0 (K) son las entalpías, entropías y temperaturas específicas en el estado de referencia (25 °C), x_i representa la fracción molar, y_i (kg/kmol) el peso molecular, h (kJ/kmol) la entalpía, R (kJ/kmol.K) es la constante de los gases ideales, P_{GT} (kPa) es la presión de los gases de escape y P_{atm} es la presión atmosférica.

Exergía química

La exergía química específica de las corrientes de en un sistema de producción de biocombustibles puede determinarse como:

$$e_{ch} = \frac{\sum x_i \cdot e_{ch-comp} + T_0 \cdot R \cdot \sum x_i \cdot \ln(x_i)}{\sum \text{Peso} x_i \cdot y_i} \quad (\text{Ec. 3})$$

Donde $e_{ch-comp}$ es la exergía química estándar de cada componente. La exergía cinética y potencial no se tuvieron en cuenta, debido a que el análisis se realiza sobre la biomasa, la cual no presenta velocidades significativas en los diferentes volúmenes de control en el proceso. En la Tabla 8 se evidencia la exergía total calculada mediante la (Ec. 1) para todas las corrientes del proceso con sus respectivas condiciones de operación.

Tabla 8.

Flujo de exergía total en todas las corrientes

Corriente	Flujo (ton/día)	Flujo (Kg/s)	T (K)	P (kPa)	h (kJ/kg) (-)	e (kJ/kg)	etot (kW)
A	46.49	0.54	298.15	101.33	8244.33	1624.76	874.25
B	3953.51	45.76	298.15	101.33	15857.30	50.00	2287.91
C	1000.00	11.57	298.15	101.33	10783.40	9774.86	113134.94
D	4000.00	46.30	298.15	101.33	15768.90	66.34	3071.51
E	5000.00	57.87	353.15	101.33	14567.60	2097.47	121381.44
F	1847.45	21.38	333.15	101.33	13133.30	5086.71	108766.70
FP	1847.45	21.38	353.15	101.33	13066.10	5096.01	108965.45
G	3152.55	36.49	353.15	101.33	15447.50	279.37	10193.70
H	900.32	10.42	333.15	101.33	10611.80	9812.89	102253.93
I	947.13	10.96	333.15	101.33	15530.10	267.91	2936.86
J	486.17	5.63	403.15	169.21	13225.20	1103.00	6206.52
K	1386.49	16.05	388.15	166.17	11622.00	6350.05	101901.33
L	583.81	6.76	388.15	166.17	8363.23	12844.87	86793.54
M	802.68	9.29	388.15	166.17	13992.20	1403.78	13041.54
N	3500.00	40.51	298.15	101.33	15857.30	50.00	2025.46
O	583.81	6.76	353.15	166.17	8719.62	12764.16	86248.20
P	3500.00	40.51	313.46	101.33	15797.90	51.96	2104.82
Q	52.40	0.61	333.15	19.68	13287.20	940.12	570.17
R	531.40	6.15	333.15	19.68	8081.17	13926.92	85657.36

En la última columna se evidencia el flujo de exergía, el cual fue calculado teniendo la exergía total e (kJ/kg) multiplicada por el flujo (kg/s) de cada corriente.

La exergía destruida total del proceso se calculó mediante la siguiente ecuación

$$\Sigma e_Q - \Sigma e_W + \Sigma e_{me} - \Sigma e_{ms} = e_d \quad (\text{Ec. 4})$$

Donde e_Q es la exergía de calor, e_W es la exergía por trabajo, e_{me} es la exergía por unidad de masa entrando al volumen de control y e_{ms} es la exergía por unidad de masa saliendo del volumen de control.

En el cálculo de la exergía destruida se debe tener en cuenta los consumos energéticos de los motores que intervienen en cada equipo del proceso, por ende, se buscó información en el Laboratorio Nacional de Energías Renovables (NREL, 2015) el cual contienen fichas técnicas en las que especifican las propiedades de los equipos tales como dimensiones, potencia, modelo, entre otros. Para el presente trabajo se tuvieron en cuenta los requerimientos energéticos de los motores en el balance de exergía los cuales se dimensionaron a la capacidad instalada de la planta como se evidencia en la Tabla 9.

Tabla 9.

Trabajo de motores necesario de cada equipo.

Equipo	Motor	Potencia (kW)
R-101	M1	1100
S-102	M2	40
R-102	M3	1100
S-103	M4	15
E-102	M5	45
T-101	M6	170

Nota: NREL, 2015

Teniendo las potencias entregadas por cada motor se procede a realizar el balance de exergía utilizando la (Ec. 4) para cada volumen de control (ver Figura 3).

Tabla 10.

Balances de exergía en los equipos.

Equipos	Entradas (kW)	Salidas (kW)	Ed (kW)	%ed
M-101	3162.16	3071.51	90.65	0.73%
R-101	117306.46	121381.44	-4074.98	-32.66%
S-101	121381.44	119159.15	2222.28	17.81%
E-101	108965.45	108766.70	198.75	1.59%
S-102	108806.70	105190.79	3615.90	28.98%
R-102	109560.45	101901.33	7659.12	61.38%
S-103	101916.33	99835.08	2081.25	16.68%
E-102	88864.00	88353.02	510.99	4.09%
T-101	86418.20	86243.45	174.75	1.40%
Total			12478.71	100%

Con los cálculos obtenidos en la Tabla 10, se evidencia que la mayor destrucción de exergía se presenta en la zona termoquímica, zona donde ocurren las reacciones y el ingreso de vapor con un valor de 7659.120 kW que representa el 61.38% de la destrucción de exergía total del proceso, este equivale a más de la mitad de destrucción de exergía con lo cual se debe considerar la oportunidad de estudiar o analizar las posibles mejoras desde el punto de vista de diseño o parámetros operacionales. Según Ofori-Boateng & Lee (2013), la destrucción de exergía se produce cuando no se controla la diferencia de temperatura entre el suministro de vapor y la biomasa; como en el equipo de pretratamiento estudiado el flujo de vapor que ingresa al reactor de

pretratamiento es desconocido, se utilizó un valor de 0.6 kg de vapor/ kg de bagazo húmedo basados en el rango propuesto por Silva & Oliveira (2014) obteniéndose un gradiente de temperatura entre las corrientes de aproximadamente 70°C. En consecuencia, la temperatura y el flujo de vapor son los principales parámetros de estudio para el análisis de sensibilidad con el fin de disminuir la exergía destruida y poder aumentar la eficiencia exergética del proceso.

La eficiencia exergética se define como:

$$n_{\text{exergética}} = 1 - \frac{e_d}{e_{\text{in}}} \quad (\text{Ec.5})$$

Donde e_d es la exergía destruida y e_{in} es la exergía total de alimentación.

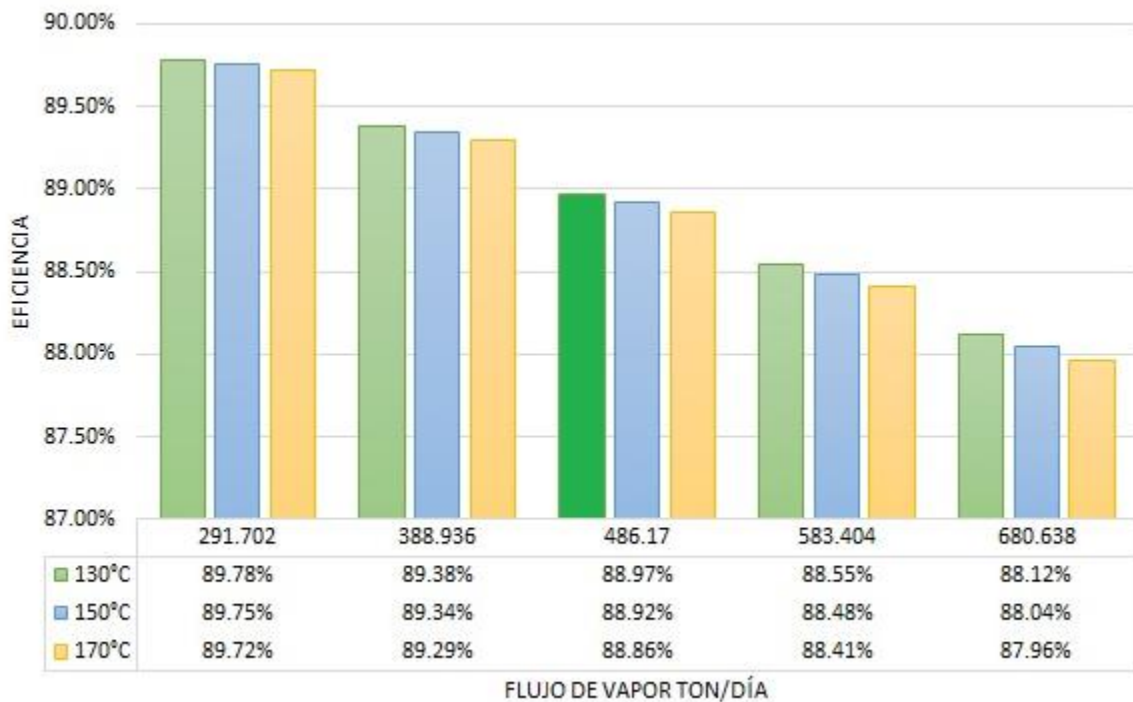
Las eficiencias de la exergía a menudo brindan conocimientos más esclarecedores sobre el desempeño del proceso que las eficiencias energéticas, debido, a que brindan una medida del potencial de mejora, obteniendo como resultado una eficiencia exergética de 88.97%.

Con el fin de encontrar una mejora exergética se implementó un análisis de sensibilidad local, analizando la corriente de vapor, debido que el flujo de vapor en el equipo de pretratamiento al ser un parámetro cualitativo y no cuantitativo, fue de interés estudiar el valor adecuado y comprobar si tenía efectos significativos en el análisis exergético, el flujo de vapor y la temperatura del mismo se variaron simultáneamente en un rango de más o menos 20% y 40%, con el fin de observar cómo se comporta la variable de salida, es decir la eficiencia exergética. Los resultados se muestran en la Figura 4.

Variación de Parámetros

Figura 4.

Variación de Temperatura y Flujo de Vapor en el Reactor de Pretratamiento



En el análisis de sensibilidad, el peso de cada parámetro se mide por la correlación entre el parámetro y su respuesta (García Moreno et,al., 2015). En la Figura 4, los valores de referencia se encuentran en color verde más oscuro y se evidencia que trabajando a menor flujo de vapor y temperatura, la eficiencia exergética tiende a aumentar, en este caso con un valor de 0.81%. En el presente estudio no se trabajó un flujo y temperatura menor de 291.702 ton/día y 130°C respectivamente en la corriente de vapor, debido a que a condiciones menos severas el vapor no estaría aportando en el rompimiento de la estructura cristalina, lo que afecta directamente en la solubilización de la hemicelulosa y lignina presentes en el bagazo.

5. Conclusiones

La necesidad de adquirir información hace que la ecuación de búsqueda sea una herramienta para expresar de forma más exacta los requerimientos investigativos del usuario. En publicaciones encontradas relacionadas con el equipo de pretratamiento, hay cerca de 49 publicaciones que estudian sólo la etapa de pretratamiento con estudios exergéticos y con bagazo de caña; los demás artículos investigados se enfocan en todo el proceso de producción de bioetanol.

El proceso de pretratamiento requiere cantidades de agua considerables como en la zona de impregnación (3953.51 ton/día). En el balance de masa se optó por recircular las corrientes de salida de las prensas ya que en su mayoría contiene agua, pero se concluyó que no es viable recircular el agua debido a que se genera una acumulación de sólidos solubles en el proceso.

El software Aspen Plus fue una herramienta influyente debido a que permitió simular el equipo de pretratamiento, así como facilitó el cálculo de variables termodinámicas para la realización del análisis exergético como la entalpía, entropía y fracciones molares. No obstante, la base de datos manejada del simulador no contiene suficiente información hacia los materiales lignocelulósicos, aunque ofrece maneras de ingresar nuevos compuestos manualmente con las propiedades de cada uno de ellos. Por ende, se tomó la base de datos creada por el NREL la cual es respaldada para modelar biomasa lignocelulósica debido a que es un estudio de varios años. Así mismo, se presentaron dificultades al momento de realizar la simulación debido a que no se encontraron equipos con las mismas similitudes del equipo de pretratamiento, por lo tanto, se buscó la manera más apropiada para adecuar los equipos dados en el simulador con los requeridos del proceso.

Al variar las condiciones de operación del flujo de vapor que interactúa con la biomasa mediante un análisis de sensibilidad local se estimó que el flujo de vapor de referencia 486.17 ton/día disminuyéndolo a un valor de 291.702 ton/día equivalente a un 40% menos y trabajándolo a la temperatura de referencia 130°C, presenta mejores eficiencias exergéticas, de 88.97% a 89.78%. En este caso la eficiencia aumenta debido a la disminución del flujo exergético en la entrada de la zona termoquímica lo que conlleva a que el gradiente de exergía respecto a la entrada y salida del volumen de control sea menor. Con el flujo de vapor determinado se asegura que el vapor cumpla la función de romper y solubilizar cadenas de celulosa, hemicelulosa y lignina, al igual que facilita la accesibilidad enzimática en etapas posteriores.

6. Recomendaciones

Como complemento a este estudio se recomienda implementar un análisis exergoeconómico que permita determinar mejoras en el proceso de pretratamiento en función de aspectos económicos, así como realizar estudios enfocados en el ámbito ambiental como un análisis de ciclo de vida del proceso. Por otra parte, es importante analizar cómo influirían los demás parámetros del proceso mediante un análisis de sensibilidad global que involucre más de dos parámetros y otros volúmenes de control como la etapa final de molienda y enfriamiento del equipo de pretratamiento, debido a que el análisis de sensibilidad global al abarcar varios parámetros simultáneamente no estuvo al alcance de este estudio.

Referencia

- Acuña Barragán, F. G., & Contreras Navas, Ó. (2017). *Análisis tecnoeconómico del proceso de producción de etanol, implementando un pretratamiento termomecánico con ácido sulfúrico diluido y su comparación con el caso base del NREL*. U. Bucaramanga, Colombia: Universidad Industrial de Santander.
- Aden, A., Ruth, M., Ibsen, K., Jechura, J., Neeves, K., Sheehan, J., ... & Lukas, J. (2002). *Lignocellulosic biomass to ethanol process design and economics utilizing co-current dilute acid prehydrolysis and enzymatic hydrolysis for corn stover* (No. NREL/TP-510-32438). National Renewable Energy Lab., Golden, CO.(US).
<https://www.nrel.gov/docs/fy02osti/32438.pdf>
- Asocaña. (2020, julio). *Informe anual de Asocaña con aspectos generales del Sector Agroindustrial de la Caña de Colombia 2019–2020 y Anexos estadístico*. <https://www.asocana.org/modules/documentos/3/363.aspx>
- Cherubini, F. (2010). The biorefinery concept: using biomass instead of oil for producing energy and chemicals. *Energy conversion and management*, 51(7), 1412-1421.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0196890410000373>
- Chuetor, S., Champreda, V., & Laosiripojana, N. (2019). *Evaluation of combined semi-humid chemo-mechanical pretreatment of lignocellulosic biomass in energy efficiency and waste generation*. *Bioresource technology*. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0960852419311964>
- Davis, R., Tao, L., Tan, E. C. D., Bidy, M. J., Beckham, G. T., Scarlata, C., ... & Schoen, P. (2013). *Process design and economics for the conversion of lignocellulosic biomass to*

- hydrocarbons: dilute-acid and enzymatic deconstruction of biomass to sugars and biological conversion of sugars to hydrocarbons* (No. NREL/TP-5100-60223). National Renewable Energy Lab. (NREL), Golden, CO (United States).
<https://www.nrel.gov/docs/fy14osti/60223.pdf>
- Dincer, I., & Rosen, M. (2012). *Exergy: energy, environment and sustainable development*. Newnes. . Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/book/9780080970899/exergy>
- García-Moreno, A., González-Barbosa, J., Hurtado-Ramos, J., Ornelas-Rodríguez, F., & Ramírez-Pedraza, A. (2016). *Análisis de la sensibilidad en un modelo de calibración cámara-LiDAR*. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, 32(4), 193–203. <https://doi.org/10.1016/j.rimni.2015.05.002>
- Garduño-García, A., López-Cruz, I., Ruíz-García, A., & Martínez-Romero, S. (2014). *Simulación del proceso de fermentación de cerveza artesanal*. *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, 15(2), 221–232. [https://doi.org/10.1016/s1405-7743\(14\)72212-7](https://doi.org/10.1016/s1405-7743(14)72212-7)
- Mahmood, H., Moniruzzaman, M., Iqbal, T., & Khan, M. (2019). *Recent advances in the pretreatment of lignocellulosic biomass for biofuels and value-added products*. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S245222361930015X>
- Mantilla Barbosa, N. (2017). *Desarrollo de un método de pretratamiento termomecánico continuo con ácido sulfúrico diluido, para la producción de etanol lignocelulósico a partir de bagazo de caña de azúcar*. . Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga.
- Ofori-Boateng, C., & Lee, K. (2013). *Comparative thermodynamic sustainability assessment of lignocellulosic pretreatment methods for bioethanol production via exergy analysis*.

- Chemical engineering journal*. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1385894713005780>
- Ojeda, K., Sánchez, E., El-Halwagi, M., & Kafarov, V. (2011). *Exergy analysis and process integration of bioethanol production from acid pre-treated biomass: comparison of SHF, SSF and SSCF pathways*. *Chemical engineering journal*. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1385894711008254>
- Ortiz, P. S., & de Oliveira Jr, S. (2014). Exergy analysis of pretreatment processes of bioethanol production based on sugarcane bagasse. *Energy*, 76, 130-138. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360544214005039>
- Ortiz, P. S., & de Oliveira Jr, S. (2016). Compared exergy analysis of sugarcane bagasse sequential hydrolysis and fermentation and simultaneous saccharification and fermentation. *International Journal of Exergy*, 19(4), 459-480. <https://www.inderscience.com/info/inarticle.php?artid=75880>
- Osney, P., Antonio, R., & Geraldo, L. (2015). *Potencialidades del bagazo para la obtención de etanol frente a la generación de electricidad*. *Ingeniería, investigación y tecnología*. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1405774315000190>
- Singh, O. K. (2019). Exergy analysis of a grid-connected bagasse-based cogeneration plant of sugar factory and exhaust heat utilization for running a cold storage. *Renewable energy*, <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0960148119306640>
- Slupska, M., & Bushong, D. (2019). *Lessons from commercialization of cellulosic ethanol—a POET perspective*. . Obtenido de <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/bbb.2033>
- Solarte-Toro, J., Romero-García, J., Martínez-Patiño, J., Ruiz-Ramos, E., Castro-Galiano, E., & Cardona-Alzate, C. (2019). *Acid pretreatment of lignocellulosic biomass for energy vectors production: A review focused on operational conditions and techno-economic assessment*

for bioethanol production Renewable and Sustainable Energy Reviews. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1364032119301170>

Soltanian, S., Aghbashlo, M., Almasi, F., Hosseinzadeh-Bandbafha, H., Nizami, A. S., Ok, Y. S., ... & Tabatabaei, M. (2020). A critical review of the effects of pretreatment methods on the exergetic aspects of lignocellulosic biofuels. *Energy Conversion and Management*, 212, 112792. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0196890420303307>

Sun, S., Cao, X., & Sun, R. (2016). *The role of pretreatment in improving the enzymatic hydrolysis of lignocellulosic materials. Bioresource technology*. Obtenido de https://www.researchgate.net/publication/281426960_The_role_of_pretreatment_in_improving_the_enzymatic_hydrolysis_of_lignocellulosic_materials

Unidad de Planeación Minero Energética (UPME). (diciembre de 2019). *Plan energético nacional 2020–2025*. Obtenido de https://www1.upme.gov.co/DemandaEnergetica/PEN_documento_para_consulta

Vásquez Ruiz, C. (2014). *Modelado, simulación y potencial de sostenibilidad de procesos que involucran solventes verdes en la extracción de celulosa*. Obtenido de http://bibliotecadigital.udea.edu.co/bitstream/10495/14231/1/VasquezCesar_2019_ModeladoSimulacionPotencial.pdf

Apéndices

Apéndice A. Balance de masa pretratamiento biomasa lignocelulósica

Primera Etapa: Impregnación

Como datos conocidos se tienen los proporcionados por (Mantilla Barbosa, 2017)

- Cantidad de bagazo ingresado al tanque de impregnación con la humedad correspondiente.

- Porcentaje de sólidos a la salida del impregnador y concentración de ácido sulfúrico

Nomenclatura usada en el balance:

B= Bagazo

A= Agua

H= Acido

\dot{m}_{AX} = Masa de agua en la corriente x

\dot{m}_{STX} = Masa de solidos totales en la corriente x

\dot{m}_{HX} = Masa de ácido en la corriente x

\dot{m}_{TX} = Masa total en la corriente x

\dot{m}_{SIX} = Masa de solidos insolubles

\dot{m}_{SSX} = Masa de solidos solubles

w_{BX} = Composición del bagazo en la corriente x

A partir de los datos conocidos según la Figura 3 se determina las composiciones en la corriente E

Corriente C

Sabiendo que la biomasa a pretratar contiene un porcentaje de humedad del 50% y teniendo un flujo de 1000 ton/día:

$$\dot{m}_{AC} = 500 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{STC} = 500 \text{ ton/día}$$

En la siguiente tabla se presentan los flujos y composiciones de entrada y salida en el reactor de impregnación del bagazo. El flujo de entrada y la composición de salida fueron tomados de (Mantilla Barbosa, 2017) en la página 309, con estos datos es posible calcular el flujo de salida de cada compuesto del reactor de impregnación teniendo en cuenta que en la corriente de salida del reactor se conservan las 500 ton/día de sólidos totales.

$$\text{Flujo de cenizas en E} = 500 \text{ ton/día} \left(\frac{5.48\%}{100\%} \right)$$

$$\text{Flujo de cenizas en E} = 27.4 \text{ ton/día}$$

Tabla 11.

Composición y flujos del bagazo de caña de azúcar

Composición y flujo del bagazo de caña de azúcar				
Corriente		C		E
Compuestos	%	Flujo (Ton/día)	%	Flujo (Ton/día)
Cenizas	5.49	27.45	5.48	27.45
Glucano	36.99	184.95	35.64	178.39
Xilano	22.41	112.05	20.30	101.61
Arabinano	1.90	9.50	1.24	6.22
Lignina	22.27	111.35	22.25	111.35
Acetato	4.91	24.55	3.85	19.27
Extractivos	6.03	30.15	6.02	30.15
Productos	-	-	5.21	26.1
	100.00	500	100.00	500

Corriente E

El porcentaje de sólidos a la salida del impregnador es del 10% por lo tanto

$$w_{STE} = 0.1 \frac{\text{ton sólidos secos}}{\text{ton sólidos totales}}$$

Para conocer la totalidad de la corriente E se puede partir de los datos conocidos, como el flujo de bagazo y el porcentaje de sólidos

$$\dot{m}_{STE} = w_{STE} \dot{m}_{TE}$$

Despejando el flujo total en la corriente E

$$\dot{m}_{TE} = \frac{\dot{m}_{STE}}{w_{STE}}$$

$$\dot{m}_{TE} = \frac{500 \text{ ton bag}}{0.1 \frac{\text{ton bag}}{\text{ton tot}}}$$

$$\dot{m}_{TE} = 5000 \text{ ton tot/día}$$

$$\dot{m}_{STE} = 500 \text{ ton/día} \quad 10\%$$

$$\dot{m}_{HE} + \dot{m}_{AE} = 4500 \text{ ton día} \quad 90\%$$

Teniendo una concentración de 1% p/p y teniendo la (Ec. 6) se determina la relación masa del ácido- masa de la solución:

$$\% \frac{p}{p} = \frac{\text{masa ácido}}{\text{masa solución}} * 100 \quad (\text{Ec. 6})$$

$$1\% = \frac{\dot{m}_{HE}}{\dot{m}_{AE} + \dot{m}_{HE} + \dot{m}_{SSE}} * 100$$

$$\frac{1}{100} = \frac{\dot{m}_{HE}}{\dot{m}_{AE} + \dot{m}_{HE} + \dot{m}_{SSE}}$$

En los sólidos solubles se incluyen los productos junto con el extractivo del bagazo

$$\dot{m}_{SSE} = 26.1 \text{ ton/día} + 30.15 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{SSE} = 56.25 \text{ ton/día}$$

Reemplazando en la (Ec. 6)

$$\frac{1}{100} = \frac{\dot{m}_{HE}}{4500+56.25}$$

$$\dot{m}_{HE} = 0.01(4556.25)$$

$$\dot{m}_{HE} = 45.56 \text{ ton/día}$$

La suma de cada compuesto determina el total de la corriente E por lo tanto

$$\dot{m}_{TE} = \dot{m}_{SSE} + \dot{m}_{SIE} + \dot{m}_{HE} + \dot{m}_{AE} \quad (\text{Ec. 7})$$

Donde \dot{m}_{SIE} representa los sólidos insolubles en este caso se calculan

$$\dot{m}_{STE} = \dot{m}_{SSE} + \dot{m}_{SIE}$$

Teniendo los sólidos totales y los sólidos solubles se reemplaza

$$500 = 56.25 + \dot{m}_{SIE}$$

$$\dot{m}_{SIE} = 444.3 \text{ ton/día}$$

Reemplazando los valores conocidos en la (Ec. 7).

$$5000 = 56.25 + 444.3 + 45.56 + \dot{m}_{AE}$$

$$5000 = 546.11 + \dot{m}_{AE}$$

$$\dot{m}_{AE} = 4453.9 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TE} = 5000 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{SSE} = 56.25 \text{ ton/día} \quad 1.12\%$$

$$\dot{m}_{SIE} = 444.3 \text{ ton/día} \quad 8.87\%$$

$$m_{HE} = 45.56 \text{ ton/día} \quad 0.1\%$$

$$m_{AE} = 4453.9 \text{ ton/día} \quad 89.1\%$$

Según los datos reportados en la Tabla 21 de (Mantilla Barbosa, 2017), se tienen los datos a la salida del reactor de los productos, sin embargo, estos datos no son precisos, por lo que se realizan los respectivos ajustes reportados por el (Laboratorio Nacional de Energías Renovables NREL, 2002) de multiplicar por el factor de corrección los valores de la glucosa, xilosa y arabinosa (monómero). Estos valores son pequeños, pues ocurren reacciones a muy bajas conversiones.

Factor corrección glucosa: 0.9

Factor corrección xilosa y arabinosa: 0.8

Glucosa :0.04 g/L

$$0.04 (0.9) \left(\frac{\text{gluc}}{\text{L}} \right) \left(\frac{1\text{kg}}{1000\text{g}} \right) \left(\frac{1000\text{L}}{1\text{m}^3} \right) \left(\frac{1\text{ ton}}{1000\text{kg}} \right) = 3.6 \times 10^{-5} \text{ ton/m}^3$$

Tomando una densidad de la solución de 1 ton/m^3 y conociendo que el flujo de la solución es la suma de agua, ácido y sólidos solubles ($m_{AF} + m_{HF} + m_{SSF}$) el flujo de glucosa es

$$m_{glucosa} = 4556.25 \text{ ton/ día} \left(\frac{1\text{m}^3}{1\text{ton}} \right) \left(\frac{0.000036\text{ton}}{1\text{m}^3} \right)$$

$$m_{glucosa} = 0.16 \text{ ton/día}$$

El total mostrado en la Tabla 12 refleja un valor total de 31.96 ton/día sin embargo el balance presenta un valor inferior de 26.1 ton/día por lo cual estas cifras se someten a un nuevo ajuste.

Tabla 12.

Valores ajustados de los monómeros y oligómeros de la biomasa

	Compuesto	g/l	ton/m ³	ton/día	Ajuste NREL	ton/día	%	ton/día Ajustada
Monómeros	Glucosa	0.040	0.00004	0.182	0.000036	0.164025	0.513	0.134
	Xilosa	0.260	0.00026	1.185	0.00021	0.9477	2.966	0.774
	Arabinosa	1.250	0.00125	5.695	0.001	4.55625	14.257	3.721
	Ácido	1.420	0.00142	6.470		6.47	20.246	5.284
	Acético							
Oligómeros	Glucosa	1.730	0.00173	7.882		7.882	24.664	6.437
	Xilosa	2.620	0.00262	11.937		11.937	37.353	9.749
	Arabinosa		0.00000	0.000			0.000	0.000
	Acido						0.000	0
	Acetico							
Total			0.0073	33.352		31.96	100.00	26.1

Corriente F

El porcentaje de solidos totales a la salida del prensado es del 25% por lo tanto, se busca que se cumpla la equivalencia. Como no se sabe la composición de cada corriente se realiza a prueba y error hasta cumplir que el 25% corresponda a los sólidos totales.

- Asumiendo que en F continúan 1500 ton/día del líquido

$$\dot{m}_{liq} = \dot{m}_{HF} + \dot{m}_{AF} + \dot{m}_{SSF}$$

$$\dot{m}_{liq} = 1500 \text{ ton/día}$$

Los 1500 ton/día equivalen a un 30% de la corriente de líquido en E por lo tanto

$$m_{SSF} = 45.56 \text{ ton/día (30\%)}$$

$$m_{SSF} = 13.668 \text{ ton/día}$$

Teniendo los sólidos totales la suma de

$$m_{STG} = m_{SIG} + m_{SSG}$$

$$m_{STG} = 443.75 \text{ ton/día} + 13.668 \text{ ton/día}$$

$$m_{STG} = 457.42 \text{ ton/día}$$

La corriente total en F sería lo que se asumió más los sólidos insolubles

$$m_{TG} = 1500 \text{ ton/día} + 444.3 \text{ ton/día}$$

$$m_{TG} = 1944.3 \text{ ton/día}$$

Si se calcula el porcentaje de sólidos totales

$$457.42 \text{ ton/día} \left(\frac{100\%}{1944.3 \text{ ton/día}} \right) = \% \text{ de ST}$$

$$23.53 \% \text{ de ST}$$

No cumple, debido a que este porcentaje debe ser 25%. Se procede a suponer otro valor

- Asumiendo que en F continúan 1400 ton/día del líquido

$$m_{luq} = m_{HF} + m_{AF} + m_{SSF}$$

$$m_{luq} = 1400 \text{ ton/día}$$

Los 1400 ton/día equivalen a un 30.75% de la corriente de líquido en E por lo tanto

$$m_{SSF} = 45.56 \text{ ton/día (30.75\%)}$$

$$m_{SSF} = 14.1 \text{ ton/día}$$

Teniendo los sólidos totales la suma de

$$m_{STF} = m_{SIF} + m_{SSF}$$

$$m_{STF} = 444.3 \text{ ton/día} + 14.1 \text{ ton/día}$$

$$m_{STG} = 458.4 \text{ ton/día}$$

La corriente total en F sería lo que se asumió más los sólidos insolubles

$$m_{TF} = 1400 \text{ ton/día} + 443.75 \text{ ton/día}$$

$$m_{TF} = 1844.3 \text{ ton/día}$$

Si se calcula el porcentaje de sólidos totales

$$458.4 \text{ ton/día} \left(\frac{100\%}{1844.3 \text{ ton/día}} \right) = \% \text{ de ST}$$

$$24.8\% \text{ de ST}$$

Es un valor cercano por lo cual haciendo más iteraciones se llega a un valor del 25% de ST con un flujo de 1847.46 ton/día. Si cumple, por lo tanto, se puede tomar el porcentaje de líquido 30.8 % para poder calcular el flujo de agua y de ácido

$$m_{AF} = 0.308 \text{ ton/día } m_{AE}$$

$$m_{AF} = 0.308 \text{ ton/día (4453.90 ton/día)}$$

$$\dot{m}_{AF} = 1371.80 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{HF} = 0.3840 \text{ ton/día } \dot{m}_{HE}$$

$$\dot{m}_{HF} = 0.308 \text{ ton/día (45.56 ton/día)}$$

$$\dot{m}_{HF} = 14.03 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TF} = 1847.46 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{HF} = 14.03 \text{ ton/día} \quad 0.75\%$$

$$\dot{m}_{AF} = 1371.8 \text{ ton/día} \quad 74.25\%$$

$$\dot{m}_{SSF} = 17.12 \text{ ton/día} \quad 0.94\%$$

$$\dot{m}_{SIF} = 444.3 \text{ ton/día} \quad 24.05\%$$

Balance en el separador I

$$\dot{m}_{TE} = \dot{m}_{TF} + \dot{m}_{TG}$$

$$5000 \text{ ton/día} = 1847.46 \text{ ton/día} + \dot{m}_{TG}$$

$$\dot{m}_{TG} = 3152.54 \text{ ton/día}$$

Balance ácido

$$\dot{m}_{HE} = \dot{m}_{HF} + \dot{m}_{HG}$$

$$45.56 \text{ ton/día} = 14.02 \text{ ton/día} + \dot{m}_{HG}$$

$$\dot{m}_{HG} = 31.54 \text{ ton/día}$$

Balance agua

$$\dot{m}_{AE} = \dot{m}_{AF} + \dot{m}_{AG}$$

$$4453.90 \text{ ton/día} = 1370.97 \text{ ton/día} + \dot{m}_{AG}$$

$$\dot{m}_{AG} = 3082.93 \text{ ton/día}$$

Balances sólidos solubles

$$\dot{m}_{SSE} = \dot{m}_{SSF} + \dot{m}_{SSG}$$

$$56.25 \text{ ton/día} = 17.12 \text{ ton/día} + \dot{m}_{SSG}$$

$$\dot{m}_{SSG} = 39.13 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TG} = 3152.54 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{HG} = 31.54 \text{ ton/día} \quad 1\%$$

$$\dot{m}_{AG} = 3082.93 \text{ ton/día} \quad 97.77\%$$

$$\dot{m}_{SSG} = 39.13 \text{ ton/día} \quad 1.23\%$$

Corriente H

El porcentaje de sólidos totales a la salida del reactor de alimentación es del 50% por lo tanto, se busca que se cumpla la equivalencia. Como no se sabe la composición de cada corriente se realiza a prueba y error hasta cumplir que el 50% corresponda a los sólidos totales.

- Asumiendo que en H continúan 456.03 ton/día del líquido

$$\dot{m}_{luq} = \dot{m}_{HH} + \dot{m}_{AH} + \dot{m}_{SSH}$$

$$\dot{m}_{luq} = 456.03 \text{ ton/día}$$

Los 456.03 ton/día equivalen a un 32.5% de la corriente de líquido en F por lo tanto

$$m_{SSH} = 14.03 \text{ ton/día (32.5\%)}$$

$$m_{SSH} = 4.56 \text{ ton/día}$$

Teniendo los sólidos totales la suma de

$$m_{STH} = m_{SIH} + m_{SSH}$$

$$m_{STH} = 444.3 \text{ ton/día} + 4.56 \text{ ton/día}$$

$$m_{STH} = 448.86 \text{ ton/día}$$

La corriente total en H sería lo que se asumió más los sólidos insolubles

$$m_{TH} = 456.03 \text{ ton/día} + 444.3 \text{ ton/día}$$

$$m_{TH} = 900.33 \text{ ton/día}$$

Si se calcula el porcentaje de sólidos totales

$$448,86 \text{ ton/día} \left(\frac{100\%}{900.33 \text{ ton/día}} \right) = \% \text{ de ST}$$

$$50\% \text{ de ST}$$

Si cumple, por lo tanto, se puede tomar el porcentaje de líquido 32.5% para poder calcular el flujo de agua y de ácido

$$m_{AH} = 0.325 m_{AF}$$

$$m_{AH} = 0.325 (1371.8 \text{ ton/día})$$

$$m_{AH} = 445.84 \text{ ton/día}$$

$$m_{HH} = 0.325 m_{HF}$$

$$m_{HH} = 0.325 (14.03 \text{ ton/día})$$

$$m_{HH} = 4.56 \text{ ton/día}$$

$$m_{TH} = 900.33 \text{ ton/día}$$

$$m_{HH} = 4.56 \text{ ton/día} \quad 0.51\%$$

$$m_{AH} = 445.84 \text{ ton/día} \quad 49.52\%$$

$$m_{SSH} = 5.63 \text{ ton/día} \quad 0.63\%$$

$$m_{SIH} = 444.3 \text{ ton/día} \quad 49.35\%$$

Balance en el reactor de alimentación

$$m_{TF} = m_{TH} + m_{TI}$$

$$1847.45 \text{ ton/día} = 900.32 \text{ ton/día} + m_{TI}$$

$$m_{TI} = 947.13 \text{ ton/día}$$

Balance ácido

$$m_{HF} = m_{HH} + m_{HI}$$

$$14.03 = 4.56 + m_{HI}$$

$$m_{HI} = 9.47 \text{ ton/día}$$

Balance agua

$$m_{AF} = m_{AH} + m_{AI}$$

$$1371.79 \text{ ton/día} = 445.83 \text{ ton/día} + m_{AI}$$

$$\dot{m}_{AI} = 925.96 \text{ ton/día}$$

Balance sólidos solubles

$$\dot{m}_{SSF} = \dot{m}_{SSH} + \dot{m}_{SSI}$$

$$17.33 \text{ ton/día} = 5.63 \text{ ton/día} + \dot{m}_{SSI}$$

$$\dot{m}_{SSI} = 11.7 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TI} = 947.13 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{HI} = 9.472 \text{ ton/día} \quad 1\%$$

$$\dot{m}_{AI} = 925.96 \text{ ton/día} \quad 97.76\%$$

$$\dot{m}_{SSI} = 11.70 \text{ ton/día} \quad 1.23\%$$

Corriente D

Balance en el reactor

$$\dot{m}_{TD} + \dot{m}_{TC} = \dot{m}_{TE}$$

$$\dot{m}_{TD} + 1000 \text{ ton/día} = 5000 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TD} = 5000 \text{ ton/día} - 1000 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TD} = 4000 \text{ ton/día}$$

En el reactor de impregnación solo ingresa ácido por la corriente D por lo tanto $\dot{m}_{HD} =$

\dot{m}_{HE}

$$\dot{m}_{HE} = 45.56 \text{ ton/día}$$

Balance de agua en el reactor

$$\dot{m}_{AD} + \dot{m}_{AC} = \dot{m}_{AE}$$

$$\dot{m}_{AD} + 500 \text{ ton/día} = 44453.90 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AD} = 3954.4 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TD} = 4000 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AD} = 3954.44 \text{ ton/día} \quad 98.86\%$$

$$\dot{m}_{HD} = 45.56 \text{ ton/día} \quad 1.14\%$$

En el mezclador la única entrada de ácido es en la corriente A por lo que A y D son iguales en el flujo másico del ácido

$$\dot{m}_{HA} = \dot{m}_{HD}$$

$$\dot{m}_{HA} = 45.56 \text{ ton/día}$$

El ácido se consigue en la industria al 98% de pureza, por lo tanto

$$\dot{m}_{TA} = 45.56 \text{ ton/día} \left(\frac{100\%}{98\%} \right)$$

$$\dot{m}_{TA} = 46.49 \text{ ton/día}$$

La suma total de los compuestos en A es

$$\dot{m}_{TA} = \dot{m}_{HA} + \dot{m}_{AA}$$

$$\dot{m}_{TA} - \dot{m}_{HA} = \dot{m}_{AA}$$

$$\dot{m}_{AA} = 46.49 \text{ ton/día} - 45.56 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AA} = 0.93 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TA} = 46.49 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AA} = 0.93 \text{ ton/día} \quad 2\%$$

$$\dot{m}_{HA} = 45.56 \text{ ton/día} \quad 98\%$$

Balance en el mezclador

$$\dot{m}_{TA} + \dot{m}_{TB} = \dot{m}_{TD}$$

$$\dot{m}_{TB} = \dot{m}_{TD} - \dot{m}_{TA}$$

$$\dot{m}_{TB} = 4000 \text{ ton/día} - 46.49 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{TB} = 3953.51 \text{ ton/día}$$

Tabla 13.

Flujos máxicos de cada corriente en la etapa de impregnación.

Compuestos	Corrientes (ton/día)					
	A	B	C	D	E	F
Agua	0.93	3953.51	500	3954.44	4453.90	1371.79
H ₂ SO ₄	45.56			45.56	45.56	14.03
SI			469.85		444.3	444.3
SS			30.15		56.24	17.33
Total	46.49	3953.51	1000	4000	5000	1847.45

Segunda Etapa: Pretratamiento

Teniendo los datos provenientes de la corriente H que es la biomasa impregnada, la corriente ingresa a un reactor de conversión junto con un flujo de vapor de agua donde ocurren las reacciones más influyentes en el proceso ya que se evidencian conversiones más altas como se

evidencia en la Tabla 5. El flujo de vapor de agua fue una variable que en anteriores estudios no se cuantificó en el momento de realizar pruebas con la biomasa así que se buscaron datos en la literatura; según (Silva & Oliveira, 2014) se han implementado valores en otros estudios en un rango de 0.55 – 0.65 kg vapor de agua/ kg de bagazo húmedo. En el estudio realizado por el NREL usan exactamente una relación de 0.6 kg de vapor de agua/ kg de bagazo húmedo, así que se toma este dato como valor de referencia.

El reactor de pretratamiento tiene una chaqueta de calentamiento en la que se incorpora un 10% del vapor alimentado, mientras que el 90% del vapor entra en contacto directo con la biomasa y de esta manera llevar a cabo las reacciones.

Con los datos calculados anteriormente se ingresa la corriente H a un reactor de conversión RStoic junto con el flujo de vapor. Para el cálculo del flujo de vapor se tiene en cuenta la biomasa húmeda

$$\dot{m}_{TH} = 900.32 \text{ ton/día}$$

Teniendo en cuenta la relación 0.6 kg de vapor de agua/ kg de bagazo húmedo el flujo en J es

$$\dot{m}_{TJ} = 0.6 \dot{m}_{TH}$$

$$\dot{m}_{TJ} = 0.6 (900.32 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{TJ} = 540.192 \text{ ton/día}$$

Teniendo en cuenta que el 10% es para la chaqueta de calentamiento entonces

$$\dot{m}_{TJ} = 540.192 \text{ ton/día} (0.90)$$

$$\dot{m}_{TJ} = 486.17 \text{ ton/día}$$

Corriente K

Teniendo las conversiones de la Tabla 5 y adicionándolas al reactor, se ejecuta la simulación arrojando los datos mostrados en la Tabla 6 del presente trabajo.

Corriente M

Debido al suministro de vapor en el reactor en la anterior etapa, luego de que se generan las reacciones químicas algunos productos junto con el agua tienden a condensarse por lo cual es necesario extraerlos por una corriente de condensación.

Tabla 1.

Composición corriente de condensados

Condensados M (80%)	Compuestos	g/l	ton/m ³	ton/día
Monómeros	Glucosa	0.25000	0.00025	0.250
	Xilosa	10.33000	0.01033	10.309
	Arabinosa	1.24000	0.00124	1.238
	Ácido Acético	5.33000	0.00533	5.319
	Furfural	0.52000	0.00052	0.519
Oligómeros	Glucosa	5.73000	0.00573	5.719
	Xilosa	27.58000	0.02758	27.525
	Arabinosa	1.24000	0.00124	1.238
	Total			52.116

Nota: Mantilla Barbosa, 2017

La Tabla 14 fue extraída de Mantilla basados en los resultados de la caracterización de los condensados los cuales ajustados a este proceso con un valor de 52.116 ton/día. Conforme a estos datos para saber qué flujo de condensados sale del proceso, fue necesario verificar en el simulador

el flujo de productos, tanto los generados como los provenientes del reactor de impregnación, con el fin de calcular la corriente total

Condensados 52.116 ton/día

Productos en el tanque 65.458 ton/día

$$52.116 \text{ ton/día} \left(\frac{100\%}{65.458 \text{ ton/día}} \right)$$

Haciendo el respectivo cálculo se conoce el porcentaje que sale por los condensados con un valor del 80% y teniendo este porcentaje se calculan el resto de los compuestos.

$$\dot{m}_{AM} = 0.8 \dot{m}_{AK}$$

$$\dot{m}_{AM} = 0.8 (930.31 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{AM} = 744.248 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{HM} = 0.8 \dot{m}_{HK}$$

$$\dot{m}_{HM} = 0.8 (4.56 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{HM} = 3.65 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{SSN} = 0.8 \dot{m}_{SSK}$$

$$\dot{m}_{SSN} = 0.8 (68.32 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{AH} = 54.66 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{TM} = 802.55 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AM} = 744.248 \text{ ton /día} \quad 92.73\%$$

$$\dot{m}_{HM} = 3.65 \text{ ton /día} \quad 0.45\%$$

$$\dot{m}_{AH} = 54.66 \text{ ton /día} \quad 6.81\%$$

Corriente L

Sabiendo que en la corriente de condensados M sale el 80% del flujo total de la corriente K, en L continuaría el 20% más el producto principal que son los sólidos insolubles.

$$\dot{m}_{AL} = 0.2 \dot{m}_{AK}$$

$$\dot{m}_{AL} = 0.2 (930.31 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{AL} = 186.062 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{HL} = 0.2 \dot{m}_{HK}$$

$$\dot{m}_{HL} = 0.2 (4.56 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{HL} = 0.912 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{SSL} = 0.2 \dot{m}_{SSK}$$

$$\dot{m}_{SSL} = 0.8 (68.32 \text{ ton/día})$$

$$\dot{m}_{SSL} = 13.66 \text{ ton /día}$$

$$\dot{m}_{TL} = 583.94 \text{ ton/día}$$

$$\dot{m}_{AL} = 186.062 \text{ ton /día} \quad 31.86\%$$

$$\dot{m}_{HL} = 0.912 \text{ ton /día} \quad 0.16\%$$

$$\dot{m}_{SIL} = 383.31 \text{ ton/día} \quad 65.64\%$$

$$\dot{m}_{SSL} = 13.66 \text{ ton /día} \quad 2.4\%$$

Corriente O

El flujo en la corriente O sigue siendo el mismo en L, se diferencian es en cuanto al cambio de temperatura pues O es la salida de la biomasa luego de pasar por la chaqueta de enfriamiento.

Corriente N

Para saber el agua de enfriamiento, se puso en el simulador un intercambiador el cual pide las temperaturas de salida para cada corriente y de esta forma estima el flujo de agua necesario para el proceso, dando un resultado de 8466.74 ton/día.

Corriente Q

La biomasa pasa por un flash con el fin de separar el slurry pretratado de los vapores que se generan en el proceso. No se conoce con exactitud la cantidad de vapor de esta corriente por lo cual se acudió a la simulación del NREL donde se pudo establecer un flujo ya que en sus estudios se conocen la cantidad generada de vapor la cual fue de un porcentaje del 27.61% de la corriente total. De esta manera se estableció que la corriente Q equivale a 52.44 ton/día

$$m_{TQ} = 583.94 \text{ ton/día} \left(\frac{27.61\%}{100\%} \right)$$

$$m_{TQ} = 52.44 \text{ ton/día}$$

Corriente R

Por último, la corriente R es el slurry pretratado teniendo como flujos los siguientes

Tabla 15.

Componentes en el slurry pretratado

Corriente S	Compuesto	Flujo (ton/día)	Porcentaje
	Agua	134.19	25.25
	H ₂ SO ₄	0.91	0.17
Sólidos Insolubles (SI)			
Bagazo seco	Celulosa	173.577	32.66
	Xilano	60.15	11.32
	Arabinano	5.65	1.06
	Lignina	111.35	20.95
	Acetato	5.13	0.96
	Cenizas	27.45	5.16
Sólidos solubles (SS)			
	Extractivos	0.60	0.114
Monómero	Glucosa	0.082	0.015
	Xilosa	2.741	0.516
	Arabinosa	0.205	0.038
	Ácido acético	2.382	0.448
	Furfural	0.008	0.001
Oligómero	Glucosa	1.020	0.192
	Xilosa	6.047	1.138
	Total	531.50	100

Tabla 16.

Flujos máxicos de cada corriente en la etapa de pretratamiento.

Compuestos	Corrientes (ton/día)											
	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
Agua	3082.0	445.8	925.9	486.1	930.31	186.0	744.2	8466.7	186.0	8466.7	51.8	134.1
H ₂ SO ₄	31.527	4.56	9.472		4.56	0.91	3.65		0.91			0.91
SI		444.3			383.31	383.3			383.3			383.3
SS	38.93	5.63	11.70		68.32	13.66	54.66		13.66		0.57	13.09
		900.3	947.1	486.1	1386.4	583.9	802.5	8466.7	583.9	8466.7	52.4	531.5
Total	3152.5	2	3	7	9	4	5	4	4	4	4	0