

**DISEÑO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA HERRAMIENTA DE CÁLCULO EN
EXCEL Y ASPEN HYSYS PARA LA SIMULACIÓN DE BIORREACTORES EN
CONTINUO**

**KATHERINE DEL ROSARIO RÍOS LÓPEZ
FAUSTO ENRIQUE RUEDA CORREA**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2015

**DISEÑO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA HERRAMIENTA DE CÁLCULO EN
EXCEL Y ASPEN HYSYS PARA LA SIMULACIÓN DE BIORREACTORES EN
CONTINUO**

**KATHERINE DEL ROSARIO RÍOS LÓPEZ
FAUSTO ENRIQUE RUEDA CORREA**

**Trabajo de grado para optar el título de
Ingeniero Químico**

Director

**IVÁN DARÍO ORDÓÑEZ SEPÚLVEDA
Ingeniero Químico**

Codirector

PhD. VIVIANA SÁNCHEZ TORRES

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2015

AGRADECIMIENTOS

A nuestro director, el Ingeniero Químico Iván Darío Ordóñez Sepúlveda, por su total entrega, sus buenos consejos, por brindarnos todo su conocimiento para alcanzar esta meta.

A nuestra codirectora PhD. Viviana Sánchez Torres por guiarnos durante el proceso, por ayudarnos siempre a resolver todas las dudas y sacar este proyecto adelante.

A la PhD. Liliana del Pilar Castro, porque gracias a su asesoría pudimos enfocar nuestros objetivos, su colaboración fue muy importante para nuestro trabajo de grado.

DEDICATORIAS

A Dios, por haberme permitido gozar de buena salud para poder conseguir este logro.

A mi madre Rosario, mi motivación más grande, la persona más importante de mi vida por quién me propuse alcanzar cada una de mis metas. A mi padre Elías, mi gran amor, por darme la mano cuando sentía que el camino se hacía más difícil. A ustedes por siempre mi corazón y mi agradecimiento.

A mi hermanito Javi, el regalo más grande, mi inspiración, mi razón de ser, mi todo.

A Fausto, por su paciencia y comprensión, por sacrificar su tiempo para ayudarme a cumplir mis objetivos. - Sin ti nada de esto hubiera sido posible -.

Katherine.

A Dios, por darme la sabiduría y permitirme cumplir esta meta.

A mis padres, Ana y Fausto, por todo su amor, apoyo y esfuerzo. Sin ustedes nada hubiera sido posible.

A mi hermana Sandra, por su cariño y ser la voz de la perseverancia a lo largo de este camino.

A mi abuelo Modesto, por los buenos consejos que me daba desde niño.

A Katherine, por toda su entrega y apoyo desinteresado en medio de tantas dificultades.

Fausto.

TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	14
1. FORMULACIÓN DEL PROYECTO	15
1.1. DESCRIPCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	15
1.2. IMPACTO ESPERADO	15
1.3. OBJETIVOS	16
1.3.1. Objetivo general	16
1.3.2. Objetivos específicos	16
2. MARCO TEÓRICO	17
2.1. HERRAMIENTA DE CÁLCULO COMO MEDIACIÓN PEDAGÓGICA ...	17
2.2. MODELOS DE ENSEÑANZA VIRTUAL	17
2.2.1. Programas comerciales	17
2.2.1.1. Simuladores	17
2.2.1.2. Otros simuladores de procesos químicos	18
2.2.2. Herramientas de cálculo	18
3. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA	19
3.1. ANÁLISIS DE LA NECESIDAD	19
3.2. SELECCIÓN DE LOS PROGRAMAS A UTILIZAR	19
3.3. REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE	20
3.4. ESTRUCTURA DEL CONTENIDO DE BIOSIM	20
3.4.1. Estequiometría	21
3.4.2. Ajuste de parámetros	23
3.4.3. Simulación y diseño	24
3.4.4. HYSYS	24
3.5. DISEÑO Y MONTAJE DE LA INTERFAZ	24
3.6. PRUEBA Y AJUSTE	25
3.7. ORIENTACIÓN AL USUARIO	26
3.7.1. Limitaciones de la herramienta	26
3.8. ESTRUCTURA DEL CONTENIDO DE BIOSIM	27

3.9. PRODUCTO FINAL.....	27
4. ANÁLISIS DE RESULTADOS	28
4.1. ANÁLISIS DE VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA	28
4.2. ANÁLISIS DE LA EVALUACIÓN DE LA HERRAMIENTA.....	28
4.2.1. Modificaciones realizadas a la herramienta	30
5. CONCLUSIONES.....	31
6. RECOMENDACIONES	32
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	33
BIBLIOGRAFÍA	35
ANEXOS.....	37

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: Esquema de las etapas de la metodología.....	19
FIGURA 2: Interfaz gráfica de BIOSIM en Excel.....	25
FIGURA 3: Simulación de un biorreactor con un separador de fases.....	26
FIGURA 4: Evaluación del desempeño de BIOSIM Parte 1	29
FIGURA 5: Evaluación del desempeño de BIOSIM Parte 2	29

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A: INTERFAZ GRÁFICA DE LA HERRAMIENTA DE CÁLCULO BIOSIM	37
ANEXO B: EJERCICIOS DETALLADOS DE APLICACIÓN PARA LA HERRAMIENTA.....	42
ANEXO C: EJERCICIOS DE APLICACIÓN RESUELTOS POR LA HERRAMIENTA.....	49
ANEXO D: FORMATO DE ENCUESTA DE ACEPTACIÓN DE LA HERRAMIENTA.....	54
ANEXO E: MANUAL DEL USUARIO - BIOSIM	56

TITULO: DISEÑO E IMPLEMENTACIÓN DE UNA HERRAMIENTA DE CÁLCULO EN EXCEL Y ASPEN HYSYS PARA LA SIMULACIÓN DE BIORREACTORES EN CONTINUO*

AUTORES: KATHERINE DEL ROSARIO RÍOS LÓPEZ
FAUSTO ENRIQUE RUEDA CORREA **

PALABRAS CLAVES: BIORREACTORES EN CONTINUO, HERRAMIENTA DE CÁLCULO, APRENDIZAJE, SIMULACIÓN.

RESUMEN:

El objetivo principal de este trabajo de grado es crear una herramienta de cálculo en Excel y Aspen HYSYS que permita efectuar la simulación y el diseño básico de biorreactores en continuo.

Este material educativo computacional sirve como recurso para el aprendizaje de las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos, facilitando al estudiante la asimilación de los contenidos académicos en estas áreas y la interacción con la tecnología que cada día toma más fuerza en la enseñanza.

Para la implementación de la herramienta de cálculo, inicialmente se planteó la necesidad de un método pedagógico, que complementara el conocimiento adquirido en el papel, específicamente en los bioprocesos y que permitiera la integración de los biorreactores con otras operaciones unitarias.

Seguidamente, se estructuró el orden para llevar a cabo la simulación de este tipo de equipos: la estequiometría y calor de la reacción, el ajuste de parámetros cinéticos y finalmente la simulación y el dimensionamiento básico de un biorreactor que trabaja exclusivamente en continuo, a partir del modelo cinético de crecimiento celular más aceptado en la literatura conocido como "Modelo de Monod". A continuación, se definieron las estrategias y los programas computacionales a utilizar, se creó la herramienta, se verificó, se evaluó y por último se validó, con la ayuda de los estudiantes de la asignatura de Bioprocesos quienes probaron su funcionamiento y expresaron su satisfacción.

BIOSIM (herramienta de cálculo) se comprobó por medio de un caso reportado en la literatura que además es uno de los procesos biotecnológicos con más fuerza en nuestro país, la producción de etanol (Fermentación etanólica continua anaeróbica con *Saccharomyces Cerevisiae* resistente al alcohol), obteniendo resultados similares a los expuestos en la literatura, los cuales permiten concluir que la herramienta es acertada.

*Trabajo de grado

**Facultad de Ingenierías fisicoquímicas. Ingeniería Química. Director: Iván Darío Ordóñez Sepúlveda. Codirector: Viviana Sánchez Torres.

TITLE: DESIGN AND IMPLEMENTATION OF A TOOL FOR CALCULATING IN EXCEL AND ASPEN HYSYS FOR THE SIMULATION OF BIOREACTORS IN CONTINUOUS.

**AUTHORS: KATHERINE DEL ROSARIO RÍOS LÓPEZ
FAUSTO ENRIQUE RUEDA CORREA ****

KEY WORDS: BIOREACTORS IN CONTINUOUS, CALCULATION TOOL, LEARNING, SIMULATION.

SUMMARY:

The main objective of this work of degree is to create a tool of calculation in Excel and Aspen HYSYS that allow to effect the simulation and the basic design of bioreactors in continuous.

This computational educational material serves as a resource for learning the subjects of Bioprocesos and análisis de procesos, facilitating student interaction with technology that each day takes more strength in teaching and assimilation of the academic content in these areas.

For the implementation of the calculation tool, initially arose the need for a pedagogical method, which would complement the knowledge acquired in the paper, specifically in bioprocesses and that would allow the integration of bioreactors with other unit operations. Then, were defined to use the strategies and computer programs, was created the tool, verified, assessed and was finally validated, with the help of the Bioprocesses students who tested their performance and expressed their satisfaction.

Then, was structured the order to carry out this type of equipment simulation: the stoichiometry and heat of reaction, kinetic parameters and finally the simulation and basic dimensioning of a bioreactor that works exclusively in continuous, from the kinetic model of cell growth more accepted in literature known as "Monod model".

BIOSIM (tool) was checked by means of a reported case in the literature which is also one of the biotechnological processes with more force in our country, the production of ethanol (fermentation in anaerobic continuous ethanol with *Saccharomyces Cerevisiae* resistant to alcohol), obtaining results similar to those outlined in the literature, which allow to conclude that the tool is correct.

*Bachelor Thesis.

**Facultad de ingenierías fisicoquímicas. Ingeniería química. Director: Iván Darío Ordóñez Sepúlveda. Codirector: Viviana Sánchez Torres.

INTRODUCCIÓN

El gran avance tecnológico de los últimos años ha impulsado a la búsqueda de nuevos métodos de aprendizaje que incluyan programas computacionales para su aplicación en diferentes asignaturas, permitiendo al estudiante adaptarlos para encontrar soluciones rápidas y fáciles a los ejercicios propios de la profesión. La evolución de los métodos informáticos, ha permitido afrontar la resolución de complejos matemáticos, obteniendo resultados prácticos. Así pues, la simulación intenta reproducir un proceso de forma real a partir de la solución de ecuaciones matemáticas que describen dicha realidad mediante un ordenador.

Para la Ingeniería Química, la simulación suele consistir en solucionar las ecuaciones de balance de materia y energía para procesos clásicos o bioprocesos en estado estacionario y dinámico. Teniendo en cuenta que cada vez es mayor el número de procesos industriales que involucra el uso de los microorganismos; debido al poco impacto negativo que tienen sobre los recursos naturales, la economía y su facilidad de producción, es por esta razón que se hace indispensable la enseñanza de los bioprocesos en la academia.

Basado en lo anterior, se trazó como objetivo el desarrollo de una herramienta de cálculo (BIOSIM) en Excel y Aspen HYSYS para la simulación y diseño básico de biorreactores en continuo. En concreto esta herramienta permite calcular la estequiometría y el calor de la reacción y realizar un ajuste de los parámetros cinéticos del bioproceso; Si bien BIOSIM evita algunos cálculos dispendiosos, la verdadera finalidad de la herramienta es motivar el auto-aprendizaje del usuario y poner en práctica el conocimiento adquirido en un papel de forma más creativa y realista. Se espera que BIOSIM sea una herramienta útil no solo para las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos sino también en la vida laboral del ingeniero.

1. FORMULACIÓN DEL PROYECTO

1.1. DESCRIPCIÓN Y PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En todos los cursos de un programa académico se plantean una serie de propósitos y competencias para brindar al estudiante el conocimiento necesario que le permita a futuro actuar y dar soluciones rápidas a problemas propios de la profesión. Esto requiere de ciertas competencias pedagógicas entre las que se incluyen prácticas, trabajos grupales, exposiciones y por supuesto el manejo de un software especializado para que los estudiantes y/o usuarios interactúen con las facilidades que para el aprendizaje ofrece la informática.

Aspen HYSYS es la herramienta informática para simulación de procesos que tradicionalmente dispone la Escuela de Ingeniería Química de la UIS, herramienta disponible para que los usuarios simulen y optimicen diferentes procesos tradicionales de la industria petroquímica y química en general. Sin embargo, este software no admite la simulación de biorreactores que son los equipos propios de los bioprocesos.

Por otra parte, existe superPRO Designer, que es un ambiente computacional cuya especialidad es simular y optimizar procesos de la industria biotecnológica, farmacéutica y de alimentos. Teniendo en cuenta que el éxito de un bioproceso está en su estrecha relación con las operaciones unitarias, entonces se requiere de una herramienta de cálculo que permita mezclar ambos sistemas para poder simular un proceso que involucre tanto biorreactores como otros equipos unitarios y se pueda usar como estrategia de aprendizaje en las asignaturas de Bioprocesos y demás materias de diseño de plantas químicas, como lo es la asignatura de Análisis procesos.

Actualmente, la Escuela carece de un software o herramienta computacional que cumpla con esas características, limitando la enseñanza y el aprendizaje del contenido académico de estos cursos.

1.2. IMPACTO ESPERADO

Al terminar el proyecto; se espera que los estudiantes de las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos, tengan acceso a la herramienta de cálculo computarizada en Excel y Aspen HYSYS, que les permita realizar la simulación de biorreactores en continuo junto con otros equipos de operaciones unitarias y los incentive en el autoaprendizaje por medio de recursos interactivos.

Se espera que el docente implemente la herramienta como material de apoyo para la enseñanza, dando la posibilidad de aprender con mayor facilidad toda la temática del curso y permitiéndose a sí mismo avanzar de forma más rápida y eficiente en el contenido de la asignatura.

1.3. OBJETIVOS

1.3.1. Objetivo general

Crear una herramienta de cálculo en Excel y Aspen Hysys que permita al usuario simular biorreactores en continuo.

1.3.2. Objetivos específicos

Proporcionar al usuario una herramienta con una interfaz gráfica agradable, sencilla y de uso fácil.

Incluir dentro de las utilidades herramientas que permitan el cálculo de la estequiometría y el calor de una reacción, el ajuste de parámetros cinéticos de un modelo típico de biorreactor así una herramienta que realice el diseño básico del equipo.

Validar los resultados del modelo implementado con datos de la literatura.

Implementar estas herramientas de cálculo de biorreactores en continuo de tal forma que cumplan los objetivos de simulación y diseño propios de las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. HERRAMIENTAS DE CÁLCULO COMO MEDIACIÓN PEDAGÓGICA.

Debido a que no son muchos los métodos existentes para impartir la docencia de las asignaturas, se vuelve imprescindible hacer uso de innovaciones pedagógicas basadas en los últimos avances informáticos, herramientas para poder transmitir a los estudiantes los conocimientos de la forma más directa y rápida posible, planteando alternativas a la clase magistral [3], de forma que se produzca una motivación en los alumnos y se logren mejorías en sus resultados académicos. Estos avances dentro del campo de la docencia en ingeniería se han visto impulsados por el desarrollo de programas y algoritmos que permiten la generación de modelos virtuales matemáticos, con los que se puede predecir el comportamiento de los procesos, incluso antes de llevarlos a la realidad [1].

La forma de acceder a estos modelos virtuales se puede hacer mediante la compra de un programa comercial que cumpla con los objetivos que se pretenden alcanzar, sin embargo, la desventaja está en su alto costo de adquisición y mantenimiento, la dificultad de su adecuación a los fines docentes requeridos y la complejidad para poder hacer modificaciones en él [2]. La segunda posibilidad es la de desarrollar un modelo adecuado utilizando alguna de las herramientas de análisis existentes en el mercado, haciendo los cambios pertinentes para acondicionarlo a las necesidades de las temáticas en las diferentes asignaturas. Sin embargo, su desarrollo requiere un esfuerzo por parte del programador para adquirir la habilidad necesaria para su manejo.

2.2. MODELOS DE ENSEÑANZA VIRTUAL.

Por medio de ellos se obtienen los mejores fundamentos, información e interpretación del aprendizaje, para diseñar oportunidades más adecuadas y que el estudiante logre un mejor aprovechamiento en la adquisición de conocimiento.

2.2.1. Programas comerciales.

El uso de programas comerciales en los que el modelo ya está generado tiene como ventajas la mejora de la calidad de la docencia, su fácil obtención y la adquisición de experiencia por parte del estudiante en el conocimiento del comportamiento del sistema estudiado [1].

2.2.1.1 Simuladores.

La simulación pone a disposición del usuario todas las funcionalidades del producto, para investigar y probarlas por sí mismo. Los simuladores educativos, son programas que permiten hacer prácticas profesionales virtuales bajo las mismas características de la realidad. La formación en ciertas ramas

profesionales requiere el proceso de formación práctica que en ocasiones resulta costoso y arriesgado [5].

Ejemplos claros de simuladores dentro de la Ingeniería Química, para su aplicación en diferentes asignaturas (para este caso Bioprocesos y Análisis de procesos), son:

- **Aspen HYSYS:** Es un simulador de procesos en estado estacionario que se utiliza para predecir el comportamiento de un proceso o una serie de operaciones unitarias, a través de las relaciones básicas existentes entre las mismas, es decir, es posible simular en él toda una planta existente o en proyecto, con el fin de mejorar las especificaciones del diseño o aumentar la rentabilidad y eficiencia de operación en un proceso [4].
- **SuperPRO Designer:** Es un simulador de procesos utilizado especialmente en la industria farmacéutica, biotecnológica, química especializada, alimentos, productos de consumo y procesamiento de minerales. Es una herramienta aplicada por muchos usuarios industriales en el mundo, pero también es una herramienta de enseñanza popular [6].

2.2.1.2. Otros simuladores de procesos químicos.

- **Chemcad:** Tiene un paquete de módulos que abarca cálculo y diseño de intercambiadores de calor, simulación de destilaciones dinámicas, reactores por lotes, destilaciones por lotes, de redes y tuberías [7].
- **Prosim:** Ofrece software y servicios de investigación de simulación de procesos en las áreas de petróleo, gas, química, farmacéutica, energía y otras industrias en el mundo. (Francia) [8].
- **Winsim:** Simula procesos químicos y de hidrocarburos, incluyendo refinación, refrigeración, petroquímica, producción de gas, tratamiento de gas, tuberías, metanol, amoníaco, entre otros [9].

2.2.2. Herramientas de cálculo.

Las herramientas de cálculo son procesos desarrollados con unas características muy similares a las de los programas comerciales, mejora la calidad de la enseñanza, permite al estudiante adquirir experiencia para conocer el comportamiento del sistema, se puede adecuar como una ayuda didáctica para el docente y es flexible en su uso y función. La implementación de una herramienta de cálculo requiere de una recopilación de información e indagación en el lenguaje de programación por parte de quién va a realizarla [1].

3. DESARROLLO DE LA HERRAMIENTA

La metodología utilizada para el desarrollo de la herramienta de cálculo está definida por una serie de etapas esquematizadas en la *Figura 1*. Y explicadas con detalle más adelante.

Figura 1. Esquema de las etapas de la metodología.



3.1. ANÁLISIS DE LA NECESIDAD

En un escenario inicial, se examinaron las necesidades en el proceso de aprendizaje de las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos, la falta de una herramienta de cálculo que permitiera reforzar los conocimientos adquiridos en las clases magistrales, donde se pudieran combinar procesos biológicos con procesos químicos en general y que además tuvieran acceso todos los estudiantes dentro de la Universidad como por fuera de ella. Se consultó a algunos de los docentes y estudiantes de los respectivos cursos para analizar intereses y objetivos en el proceso de enseñanza-aprendizaje.

3.2. SELECCIÓN DE LOS PROGRAMAS A UTILIZAR

Se orientó esta búsqueda a programas computacionales que en conjunto permitieran el desarrollo de esta herramienta.

Se tuvo en cuenta, que fueran de fácil uso, con un ambiente didáctico, amigable y llamativo para el usuario y por último pero no menos importante, que se tuviera acceso a estos programas dentro y fuera de la Universidad.

Microsoft Excel y Aspen HYSYS (Software oficial de la Escuela de Ingeniería Química, UIS), fueron escogidos para crear la herramienta, cumpliendo con los criterios de selección.

La hoja electrónica de Excel es ampliamente conocida, en forma generalizada, por profesores y estudiantes en proceso de formación teniendo en cuenta que es adaptable a los diferentes campos del conocimiento. Para los ingenieros, Excel constituye una herramienta computacional muy poderosa y tiene una gran utilidad en la enseñanza y pese a que existen en el mercado programas computacionales muy sofisticados, no están tan disponibles como Excel, que usualmente forma parte del paquete básico de software instalado en los ordenadores que funcionan bajo el sistema Windows de Microsoft.

Se escogió Aspen HYSYS para el desarrollo de la simulación porque este permite la construcción de anexos mediante programación, además de estar ampliamente difundido en la Escuela de Ingeniería Química de la UIS y no poseer biorreactores para la simulación.

3.3. REVISIÓN DEL ESTADO DEL ARTE

Para el diseño y estructura de la herramienta se enfocó esta etapa en hacer una amplia búsqueda y recopilación de información del tema, fundamentada en consulta de manuales, materiales computarizados ya existentes y sitios web relacionados con los bioprocesos, los modelos cinéticos, el diseño de sus equipos, entre otros. En cuanto a la teoría, las evaluaciones y los ejercicios de prueba, se hizo una recopilación bibliográfica de diversas fuentes como libros, artículos y páginas web.

3.4. ESTRUCTURACIÓN DEL CONTENIDO DE BIOSIM

La estructura de BIOSIM se dividió en tres hojas de cálculo en Excel, basadas en la estequiometría y calor de la reacción (Balance de masa y energía), ajuste de parámetros cinéticos y simulación de biorreactores en continuo que obedecen el modelo cinético de Monod, operando en forma continua e isotérmica. Una cuarta hoja de cálculo recopila los datos requeridos para la simulación de biorreactores en Excel para ser enviados a HYSYS donde se realiza la simulación y el posterior acople de este modelo de biorreactor a otras operaciones típicas de Hysys.

El modelo de reacción química para bioprocesos que se siguió para crear la herramienta de cálculo, viene dada de la forma:



La reacción puede modificarse por parte el usuario dependiendo si la reacción es aerobia o anaerobia y si se produce un crecimiento celular o la formación de un producto extracelular.

A continuación se presenta una descripción general de cada hoja.

3.4.1. Estequiometría:

En esta hoja se realiza un balance de masa elemental para los componentes del proceso, determinando los coeficientes estequiométricos de cada uno y un calor requerido o suministrado (balance de energía) en la reacción química a partir de un balance sencillo de energía. Estos cálculos dependen del tipo de reacción (si es aerobia o anaerobia) y del compuesto que se forme, ya sea crecimiento microbiano o formación de un producto extracelular.

Determinación del calor de reacción para la biomasa: El calor de reacción para la biomasa (sea bacteria o levadura) se determina a partir de una relación matemática del calor de combustión.

La relación es descrita de la siguiente forma:

$$\Delta h^{\circ}_{c_{Biomasa}} = -q\gamma x_c \quad Ec. 2.$$

Donde $\Delta h^{\circ}_{c_{Biomasa}}$ es el calor molar de combustión en condiciones estándar, q es el calor desprendido por mol de electrones disponibles transferidos al oxígeno durante la combustión, γ es el grado de reducción del compuesto definido respecto al N_2 y x_c es el número de átomos de carbono en la fórmula molecular. Se determinó un valor de $q = 115 \text{ KJ/gmol}$, por Roels [14] que se basa en el análisis de varios compuestos de biomasa.

Teniendo en cuenta un valor de $\gamma = 4.8$ (Tabla B.2, grados de reducción de la biomasa con respecto a N_2 . Doran, Pauline. Bioprocess Engineering Principles) la fórmula molecular estándar de la biomasa $CH_{1.8}O_{0.5}N_{0.2}$ y el peso molecular de la misma 25.9 g asumiendo un 5% de cenizas en la biomasa, entonces el calor de combustión de la biomasa queda definido por:

$$\Delta h^{\circ}_{c_{Biomasa}} = - \left(115 \frac{\text{KJ}}{\text{gmol}} \right) * (4.80) * (1) * \left| \frac{1 \text{ gmol}}{25.9 \text{ g}} \right| = -21.3 \frac{\text{KJ}}{\text{g}}.$$

El calor de combustión para las bacterias puede ser tomado como $-23.3 \frac{\text{KJ}}{\text{g}}$ y para la levadura como $-21.2 \frac{\text{KJ}}{\text{g}}$. Estos valores aproximados fueron determinados por Cordier et al [15].

- **Procesos aerobios:** Para encontrar los coeficientes estequiométricos de un proceso de este tipo, se requiere además del balance elemental de masa, un valor de coeficiente de respiración que viene dado por:

$$RQ = \frac{d(CO_2)}{a(O_2)} \quad \text{Ec. 3.}$$

Un dato de rendimiento producto/sustrato en la formación de producto:

$$Y_{\frac{p}{s}} = \frac{\text{Producto generado}}{\text{Sustrato consumido}} = \frac{f}{1} \quad \text{Ec. 4}$$

El cálculo del calor de la reacción viene determinado a partir de la proporcionalidad directa entre el calor de la combustión y el grado de reducción de los compuestos. Este grado de reducción está relacionado directamente con la cantidad de oxígeno requerido para la combustión completa de una sustancia; por lo tanto, el calor producido en la reacción debe ser directamente proporcional al consumo de oxígeno [12]. En las reacciones aeróbicas, el oxígeno es el aceptor de electrones, recibiendo cuatro por cada mol de O_2 . Si un mol de O_2 se consume durante la respiración, cuatro moles de electrones deben ser transferidos. El valor de energía liberada por *gmol* de electrones transferidos es de 115 KJ. Por tanto, el cálculo del calor de la reacción para procesos aerobios se estima de la siguiente forma:

$$\Delta H^\circ_{rxn} = (\text{Electrones aceptados} * q) \quad \text{Ec. 5.}$$

$$(4 * 115)KJ = 460 KJ/Kmol \text{ de } O_2 \text{ consumido}$$

Por tanto el calor de reacción para el metabolismo aeróbico es de aproximadamente $-460 KJ$ por *gmol* de O_2 consumido [12].

- **Procesos anaerobios:** Como en este caso, el oxígeno no es el principal aceptor de electrones, entonces para determinar el calor de reacción se sigue la siguiente ecuación [12]:

$$\Delta H^\circ_{rxn} = (n\Delta h^\circ_c)_{sust.} + (n\Delta h^\circ_c)_{base \ nit} - (n\Delta h^\circ_c)_{biom.} - (n\Delta h^\circ_c)_{prod.} \quad \text{Ec. 6.}$$

Los datos de calor de combustión para diversos compuestos se encuentran disponibles en el Apéndice B (Tabla B.8 calores de combustión) del libro Bioprocess Engineering Principles, Doran.

3.4.2. Ajuste de parámetros: Se determina el valor de los parámetros cinéticos que más se adapta al proceso a partir de una serie de datos de velocidad de dilución, biomasa y sustrato usando la linealización de los diferentes valores utilizados.

La determinación de estos parámetros se hace a partir del modelo de Monod para operaciones en continuo, considerando la alimentación estéril ($X_0 = 0$), ($\mu = D$) en el Balance de biomasa:

$$FX_0 - FX + r_x V = 0 \quad \text{Ec. 7.}$$

Con un modelo de Monod que viene dado por la siguiente ecuación:

$$(D = \mu) = \frac{\mu_{\text{máx}} * S}{K_s + S} \quad \text{Ec. 8.}$$

Teniendo en cuenta que: $D = \frac{F}{V}$ Ec. 9.

Invirtiendo la ecuación de Monod se tiene la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{D} = \frac{K_s}{\mu_{\text{máx}}} \left(\frac{1}{S} \right) + \frac{1}{\mu_{\text{máx}}} \quad \text{Ec. 10.}$$

Balance de sustrato:

$$FS_0 - FS - r_s V = 0 \quad \text{Ec. 11.}$$

$$D(S_0 - S) - r_s = 0 \quad \text{Ec. 12.}$$

$$r_s = q_s X = 0 \quad \text{Ec. 13.}$$

Teniendo en cuenta que: $q_s = \left[\frac{\mu = D}{Y_{xs}} \right] + m_s$, se reemplaza en la Ec. 12.

$$D \left[\frac{S - S_0}{X} \right] = \frac{\mu = D}{Y_{xs}} + m_s \quad \text{Ec. 14.}$$

El rendimiento observado está determinado por: $Y'_{xs} = \frac{X}{S_0 - S}$, que al reemplazarlo en la Ec. 14. y haciendo las respectivas modificaciones matemáticas, se obtiene:

$$\frac{1}{Y'_{xs}} = \frac{1}{Y_{xs}} + m_s \left(\frac{1}{D} \right) \quad \text{Ec. 15.}$$

Balance de producto:

$$FP_0 - FP + r_p V = 0 \quad \text{Ec. 16.}$$

$$r_p = ((\mu = D) * Y_{px} + m_p)X \quad \text{Ec. 17.}$$

Con las ecuaciones 10 y 15 se realiza una linealización para determinar los valores de los parámetros cinéticos m_s , K_s y $\mu_{m\acute{a}x}$.

3.4.3. Simulación y diseño: Se estima la cantidad de biomasa, sustrato y producto que influyen en el bioproceso, a partir de parámetros cinéticos previamente conocidos, determinándolos a partir de las ecuaciones de balance para los biorreactores en continuo. A su vez, es posible realizar un dimensionamiento básico del biorreactor a partir de una relación de la heurística de altura y diámetro del equipo.

$$R = \frac{H}{D} \quad \text{Ec. 18.}$$

3.4.4. HYSYS: En la hoja de Excel se introducen los datos de los parámetros cinéticos del proceso y se envían a Aspen HYSYS para realizar la simulación. HYSYS se encarga de recibir los valores correspondientes a la cinética del proceso a simular desde la hoja electrónica de Excel y hace los cálculos respectivos para las corrientes de salida.

3.5. DISEÑO Y MONTAJE DE LA INTERFAZ

Esta es una de las etapas más importantes para el éxito de la herramienta de cálculo, la interfaz debe ser sencilla y de fácil manejo sin dejar a un lado que sea agradable a la vista de quienes la usan.

- Se inició creando un logo y nombre para la herramienta acorde a lo que se quería mostrar en ella.
- Se diseñaron tablas y gráficos comparativos para registrar los datos tanto de alimentación como los calculados, de forma ordenada.
- Los botones (Botones de comando) se crearon para que el usuario al dar clic en ellos le solicite a la herramienta realizar el cálculo. La hoja de "Ajuste de parámetros" realiza los cálculos una vez ingresados los datos mínimos requeridos, es decir, no necesita de un botón para la ejecución. En la parte inferior derecha de todas las hojas hay dos botones (Botón de comando) que permiten cargar un ejercicio previamente resuelto y limpiar todas las celdas para iniciar uno nuevo. (Ver Figura 2.)
- Se crearon listas desplegables para la selección de las unidades de medida correspondientes, el tipo de reacción y de biomasa; formatos condicionales para ocultar y/o mostrar celdas en caso de contener un valor numérico; casillas de verificación para gráficos y chequear si se conoce o no la

estequiometría de la biomasa y botón de opción para especificar si se presenta crecimiento microbiano o formación de producto celular.

- Se escogieron los colores de las tablas, gráficos y botones de cálculo de tal forma que fueran atractivos y visibles para el usuario y se lograra proporcionar un ambiente interactivo que motivara a su uso.
- Los elementos que componen la interfaz fueron distribuidos y ubicados de tal manera que se redujeran espacios libres para evitar errores que se pudieran generar por introducir datos o seleccionar celdas que no hacían parte de la herramienta.
- En Aspen HYSYS no se hizo un diseño de interfaz como tal, sino que se adicionó desde el diagrama de flujo una “user unit operation” llamada biorreactor con sus respectivas corrientes de alimentación, producto y calor. (Para acceder a biorreactor en HYSYS se debe tener acceso al ejemplo previamente montado en la herramienta, abrir el archivo y ejecutarlo).

Después de tener el diseño y montaje de la interfaz, se hicieron las diferentes actividades de programación con macros escritos en VBA (Visual Basic Application), definidos desde la hoja electrónica de Excel. El lenguaje VBA en el contexto de Excel, constituye una herramienta de programación que permite interactuar con las múltiples facetas de Excel y personalizar las aplicaciones que se hagan en esta hoja electrónica; se usaron entonces los macros para que la herramienta pudiera realizar los diferentes cálculos matemáticos, balances, ajustes, linealizaciones, sistemas de ecuaciones y por supuesto detalles de la interfaz.

Se utilizó también el código de VBA para la programación en HYSYS.

Figura 2. Interfaz gráfica de BIOSIM en Excel.

The screenshot shows the BIOSIM Excel interface. On the left is a logo for BIOSIM Versión 1.2-b2 and the Universidad Industrial de Santander. The main area is titled 'Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química'. It includes a chemical reaction input field: $1 \text{ sustrato} + a \text{ O}_2 + b \text{ base nitrogenada} \rightarrow c \text{ biomasa} + d \text{ CO}_2 + e \text{ H}_2\text{O} + f \text{ producto extracelular}$. There are radio buttons for 'Crecimiento microbiano' (selected) and 'Formación de producto', and a checkbox for 'Conoce la estequiometría de la Biomasa'. A dropdown menu is set to 'Aerobia'. Below this is a table for 'Fórmula molecular' with columns for Componente, C, H, O, and N. The table contains data for Sustrato (S), Oxígeno, Base nitrogenada, Biomasa (X), CO₂, H₂O, and Producto extracelular (P). To the right is a 'Balance de la reacción' table with columns for Coeficiente estequiométrico and values for a through f, and an 'Error' value of 4,2E-17. At the bottom, there is a 'CALOR DE RECCIÓN [kJ/kmol de S]' field with the value -324405,1 and a 'CALCULAR' button. There are also 'CARGAR EJEMPLO' and 'RESET' buttons.

Componente	C	H	O	N
Sustrato (S)	6	12	6	0
Oxígeno	0	0	2	0
Base nitrogenada	0	3	0	1
Biomasa (X)	1	1,8	0,5	0,2
CO ₂	1	0	2	0
H ₂ O	0	2	1	0
Producto extracelular (P)	2	6	1	0

Balance de la reacción	
	Coeficiente estequiométrico
a	0,00
b	0,17
c	0,85
d	1,75
e	0,37
f	1,71
Error	4,2E-17

3.6. PRUEBA Y AJUSTE

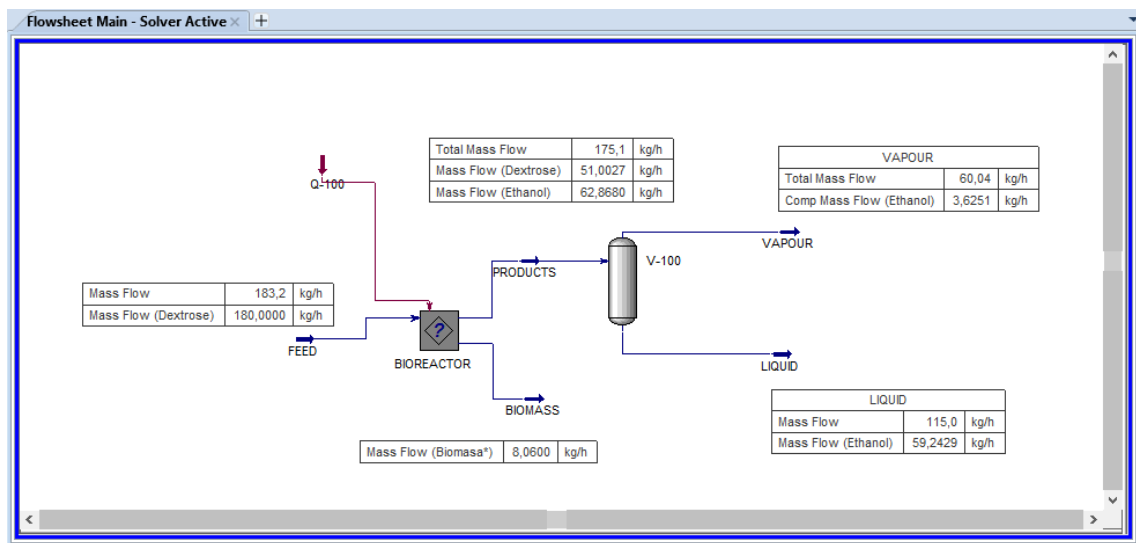
Una vez finalizada la herramienta, se realizaron las pruebas de la misma a partir de ejercicios propuestos en la literatura con el fin de comprobar su funcionamiento y corrección de posibles fallas que se pudieran presentar, como

bloqueo en las celdas, generación de errores y cálculos incorrectos, antes de presentarla a los usuarios.

Se especificaron ejercicios de la literatura para cada una de las hojas de Excel.

En la *Figura 3*. Se muestra un ejemplo de simulación de biorreactores en continuo en Aspen HYSYS, acoplándolo con otras operaciones unitarias. (Ejercicio de simulación del Anexo A). Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Figura 3. Simulación de un biorreactor en continuo con un separador de fases.



3.7. ORIENTACIÓN AL USUARIO

Se incluyó un archivo de texto como guía para el usuario que recoge información general para la ejecución, puesta en funcionamiento y uso de la herramienta de cálculo. Este explica en detalle cómo desarrollar los ejercicios y cómo usar las diferentes opciones que tiene BIOSIM, se incluye la información de contacto de quienes diseñaron la herramienta para cualquier inquietud y observación. Se invita a que sea revisado con anterioridad a la exploración de la herramienta.

3.7.1. Limitaciones de la herramienta

- **Relaciones másicas no permitidas:** La herramienta hace el cálculo de los coeficientes estequiométricos a partir de datos en unidades molares, no es posible calcular la estequiometría de la reacción en términos másicos.

- **Unidades de medida limitadas:** La herramienta tiene una lista de unidades de medida del Sistema Internacional y solo una unidad del Sistema inglés. Es posible que no se encuentren todas las unidades que se deseen.
- **Cálculo para una sola reacción:** Algunos bioprocesos cuentan con más de una reacción química para llevarse a cabo; esta herramienta de cálculo solo permite trabajar con una sola reacción.

3.8. EVALUACIÓN DE LA HERRAMIENTA

El usuario es el principal crítico de este trabajo, pues es para beneficio de él que se pensó crear esta herramienta.

Con el fin de conocer su opinión respecto a la facilidad de uso, la organización, el entorno visual, el contenido, la funcionalidad y efectividad de BIOSIM, se reunió el 22 de julio de 2015 a las 4 de la tarde en la sala 2-7 del Centro de Investigación y Tecnología (CENTIC), a un grupo de 30 usuarios (estudiantes de la asignatura de Bioprocesos II, grupo J1), a los cuales se les facilitó el acceso al material. Durante 2 horas, se hizo la presentación previa de la herramienta, una explicación extensa de su contenido, su manejo y la aplicación de un ejemplo para probar su funcionamiento. Al finalizar, cada estudiante respondió una encuesta de evaluación del proyecto.

3.9. PRODUCTO FINAL

A partir de los resultados de la evaluación y de los comentarios y sugerencias por parte de los usuarios y el docente del curso de Bioprocesos que estuvo presente, se realizaron las últimas correcciones con las cuáles se obtuvo la herramienta de cálculo final.

4. ANÁLISIS DE RESULTADOS

4.1. ANÁLISIS DE LA VALIDACIÓN DE LA HERRAMIENTA

Uno de los casos de estudio escogidos para la validación de la herramienta fue el de la fermentación etanólica continua anaeróbica con *Saccharomyces Cerevisiae* resistente al alcohol, cuyo artículo de investigación fue publicado por el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Granada.

Se hizo énfasis en la producción de etanol debido a que en los últimos años los biocombustibles se han posicionado a nivel mundial como una importante alternativa para reemplazar a los combustibles fósiles; el uso de ellos permite a los países en general, diversificar su canasta energética, hacerlos menos dependientes de los recursos no renovables y generar efectos positivos sobre el medio ambiente al basarse en insumos agrícolas.

Especialistas en temas energéticos, consideran que en nueve años Colombia podrá triplicar su oferta de etanol, gracias a los nuevos proyectos y la gran demanda. De 212 millones de galones producidos en 2015 se aspira a 325 millones en el 2020.

Teniendo en cuenta la importancia que tiene la producción de etanol para el país, considerando que es un bioproceso y que la comercialización de nuevos productos obtenidos a través del empleo de la biotecnología requiere un coordinado acople de operaciones unitarias a fin de desarrollar un proceso eficiente [11], se descubre la necesidad de la implementación de la herramienta de cálculo para simular procesos industriales que involucran el uso de sistemas biológicos.

4.2. ANÁLISIS DE LA EVALUACIÓN DE LA HERRAMIENTA

Los resultados obtenidos de la encuesta realizada a 30 estudiantes de la asignatura de Bioprocesos fueron satisfactorios en la mayoría de los casos.

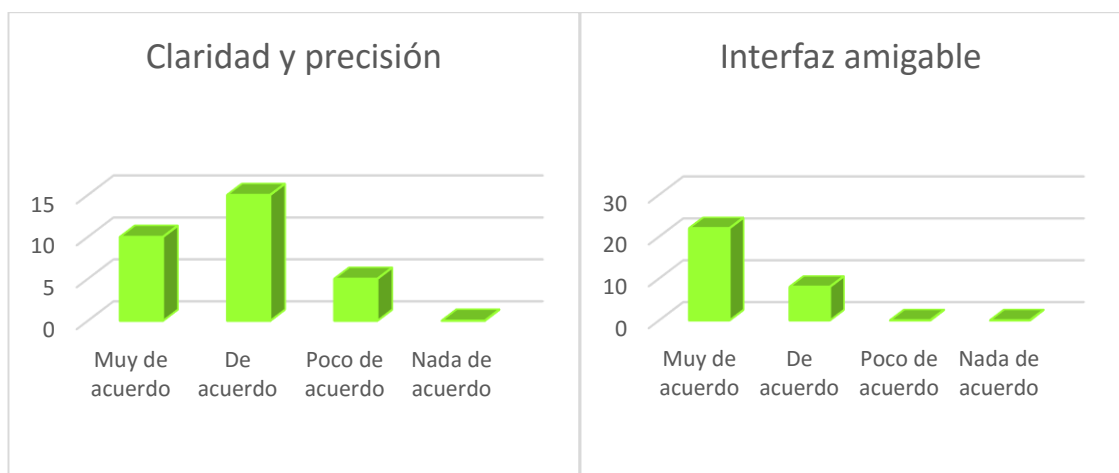
Con los resultados de las encuestas se puede observar que el desempeño de BIOSIM es bueno, siendo la utilidad de la herramienta y su organización sus mayores fortalezas.

En general, se notó gran interés de parte de los estudiantes por conocer y utilizar la herramienta, lo cual se evidenció en la motivación que tuvieron durante su explicación. Muchos de los comentarios mostraron empatía con los recursos utilizados por BIOSIM. Un gran porcentaje de usuarios coincidió en que este material sirve de complemento en la enseñanza para los cursos de Ingeniería Química, especialmente para Bioprocesos y Análisis de procesos. Incluso se consideró que podría aplicarse en la vida profesional y laboral.

Figura 4. Evaluación del desempeño de BIOSIM.



Figura 5. Evaluación del desempeño de BIOSIM.



Para la mayoría de los encuestados, la interfaz de BIOSIM resultó agradable y a pesar de la reducción de espacios y de la cantidad de datos e información, la herramienta no se muestra saturada.

Al revisar los ejemplos propuestos, los usuarios comprendieron el objetivo de la herramienta y la ayuda que puede ofrecer para resolver ejercicios del curso que al desarrollarlos a mano pueden llevar mucho tiempo y generar errores humanos de cálculo.

Con el fin de buscar la mejoría de la herramienta en las versiones futuras, se tuvieron en cuenta las sugerencias y críticas consignadas por los estudiantes en la encuesta. Se presentan a continuación:

- Mejorar la velocidad en el tiempo de cálculo y respuesta
- Permitir que la herramienta se pueda usar en todas las versiones de Aspen HYSYS.

4.2.1. Modificaciones realizadas a la herramienta.

La principal modificación que se le hizo a la herramienta después de la evaluación por parte del usuario, fue la corrección de uno de los pasos previos para la ejecución de BIOSIM con el fin de evitar un error generado por la incompatibilidad en las versiones de Aspen HYSYS que no permitía el acceso al material.

5. CONCLUSIONES

La metodología que se llevó a cabo permitió diseñar y desarrollar un material con una interfaz gráfica agradable y sencilla, que se caracteriza por ser una solución efectiva para complementar el proceso de enseñanza-aprendizaje y la interacción con las herramientas computacionales para los estudiantes de las asignaturas de Bioprocesos y Análisis de procesos de la Escuela de Ingeniería Química, UIS.

El principal valor agregado de BIOSIM, es que permite hacer la simulación de bioprocesos acoplando operaciones unitarias con el fin de obtener nuevos productos de alta eficiencia y calidad, generando en el estudiante mayor interés y estimulación por la indagación en el campo de estas asignaturas.

Con la evaluación de la herramienta por parte de los estudiantes y la validación de la misma, se pudo determinar un alto grado de aceptación entre ellos hacia BIOSIM, considerándola como una excelente estrategia de acompañamiento de la teoría de los Bioprocesos.

6. RECOMENDACIONES

Este proyecto se realizó para beneficio de los estudiantes, pensando en implementarla en diferentes asignaturas para que ellos refuercen su conocimiento, para esto se recomienda:

- Que los docentes se encarguen de divulgar la existencia de BIOSIM y motiven a sus estudiantes a explorarla y conocerla, facilitando el acceso a la misma para aquellos que deseen utilizarla desde la universidad o desde su casa.
- Se recomienda que la UIS y/o la Escuela de Ingeniería Química permitan la inclusión de esta herramienta de cálculo en un servidor, para que sea más sencilla la consulta de la misma por parte de estudiantes y docentes.
- Implementar en BIOSIM un módulo que permita simular biorreactores tipo Batch en Excel, con el fin de ampliar el uso de la herramienta y sus versiones futuras en más procesos industriales.
- Se le recomienda a los estudiantes leer con atención el manual del usuario antes de iniciar la exploración de la herramienta, para que pueda comprender mejor su utilidad y saque el mayor provecho de ella.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] GARCÍA, José., LORENZANA, Antolín., MAGDALENO, Jesús. Método didáctico para el aprendizaje del uso del sistema de cálculo simbólico MAPLE. Departamento de Ingeniería de Estructuras, Ingeniería de Terreno y Edificación. Escuela Universitaria Politécnica de Valladolid; 2005.
- [2] TAPIAS, Heberto. Un ingeniero para el futuro de Colombia. Colombia, Ciencia y Tecnología. 1999 Vol 17 No. 02, p 2-4.
- [3] ROSALES, Javier. Estrategias didácticas. Instituto Tecnológico y de estudios Superiores de Monterrey. [Citado el 15 de junio de 2015]. Disponible en <www.itesm.mx>.
- [4] GIL, Isnardo., LEGUIZAMÓN, Andrés. Análisis y simulación de procesos en estado estable y dinámico – Modulo 0. UN Virtual [Citado el 15 de junio de 2015]. Disponible en <www.virtual.unal.edu.co>.
- [5] ROJAS, Fernando. Desarrollo de simuladores basados en casos y modelación dinámica para el sostenimiento de sistemas de calidad. MCP–DIA. México, ITESM. 2003.
- [6] Intelligen, Inc. SuperPro Designer Product Features. [citado el 10 de febrero de 2015]. Disponible en <www.intelligen.com>.
- [7] ADAM, Everette, RONALD, Eberth. Administración de la producción y de las operaciones: concepto, modelo y funcionamiento. Cuarta Edición. Boston: Pearson Education. 1991, p 327p.
- [8] ProSim. Solutions de Simulation Procédés Industriels (France). [Citada el 14 de febrero de 2015]. Disponible en <www.prosim.net>.
- [9] MORA, Walter, Espinoza, José. Programación Visual Basic (VBA) para Excel y Análisis Numérico. Escuela de Matemática Instituto Tecnológico de Costa Rica. Revista Matemática. 2005 p 2-18.
- [10] MORENO, Daniela., ALBORNOZ, Danna., POVEDA, Angie. Análisis del impacto de la política de Biocombustibles en la producción del aceite de palma y la estabilización del precio interno en Colombia. Revista Civilizar de Empresa y Economía, 2012 p 81-97.
- [11] Iquimicas.com. Introducción a los procesos biotecnológicos. Staff Técnico IQuímicas. [Citado el 10 de diciembre de 2014]. Disponible en <www.iquimicas.com>.
- [12] DORAN, Pauline. Bioprocess Engineering Principles. 2 ed. Oxford, 1995 p 86-109.
- [13] SHULER, Michael y KARGI, Fikret. Bioprocess Engineering. 2 ed. Hardcover, 1987 p 155-200.

[14] ROELS, J.A. *Energetics and Kinetics in Biotechnology*, Chapter 3, Elsevier Biomedical Press, Amsterdam 1983.

[15] CORDIER, Butchs. The relationship between elemental composition and heat of combustion of microbial biomass. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 1987 Vol 25, p 305-312.

[16] MCCABE, Warren, SMITH, Julian. I HARRIOTT, Peter. *Operaciones unitarias en ingeniería química*. Sexta edición. México: Mc Graw-Hill, 2012.

[17] VARGAS, Eder., GUERRERO, Victor. “Elaboración de una herramienta informática para la estimación de costos de capital de equipos fundamentales en plantas de procesos químicos”. (Trabajo de Grado) Bucaramanga, Colombia. Universidad Industrial de Santander. 2014.

[18] ARTEGA, Juan. “Diseño e Implementación de un material educativo computarizado (MEC) para el aprendizaje del curso de Estequiometría”. (Trabajo de grado) Bucaramanga, Colombia. Universidad Industrial de Santander. 2010.

BIBLIOGRAFÍA

ADAM, Everette, RONALD, Eberth. Administración de la producción y de las operaciones: concepto, modelo y funcionamiento. Cuarta Edición. Boston: Pearson Education. 1991, p 327p.

ARTEGA, Juan. “Diseño e Implementación de un material educativo computarizado (MEC) para el aprendizaje del curso de Estequiometría”. (Trabajo de grado) Bucaramanga, Colombia. Universidad Industrial de Santander. 2010.

CORDIER, Butchs. The relationship between elemental composition and heat of combustion of microbial biomass. Appl. Microbiol. Biotechnol. 1987 Vol 25, p 305-312.

DORAN, Pauline. Bioprocess Engineering Principles. 2 ed. Oxford, 1995 p 86-109.

GARCÍA, José., LORENZANA, Antolín., MAGDALENO, Jesús. Método didáctico para el aprendizaje del uso del sistema de cálculo simbólico MAPLE. Departamento de Ingeniería de Estructuras, Ingeniería de Terreno y Edificación. Escuela Universitaria Politécnica de Valladolid; 2005.

GIL, Isnardo., LEGUIZAMÓN, Andrés. Análisis y simulación de procesos en estado estable y dinámico – Modulo 0. UN Virtual [Citado el 15 de junio de 2015]. Disponible en <www.virtual.unal.edu.co>.

Intelligen, Inc. SuperPro Designer Product Features. [citado el 10 de febrero de 2015]. Disponible en <www.intelligen.com>.

Iquimicas.com. Introducción a los procesos biotecnológicos. Staff Técnico IQuímicas. [Citado el 10 de diciembre de 2014]. Disponible en <www.iquimicas.com>.

MCCABE, Warren, SMITH, Julian. I HARRIOTT, Peter. Operaciones unitarias en ingeniería química. Sexta edición. México: Mc Graw-Hill, 2012.

MORA, Walter, Espinoza, José. Programación Visual Basic (VBA) para Excel y Análisis Numérico. Escuela de Matemática Instituto Tecnológico de Costa Rica. Revista Matemática. 2005 p 2-18.

MORENO, Daniela., ALBORNOZ, Danna., POVEDA, Angie. Análisis del impacto de la política de Biocombustibles en la producción del aceite de palma y la estabilización del precio interno en Colombia. Revista Civilizar de Empresa y Economía, 2012 p 81-97.

ProSim. Solutions de Simulation Procédés Industriels (France). [Citada el 14 de febrero de 2015]. Disponible en <www.prosim.net>.

ROELS, J.A. *Energetics and Kinetics in Biotechnology*, Chapter 3, Elsevier Biomedical Press, Amsterdam 1983.

ROJAS, Fernando. Desarrollo de simuladores basados en casos y modelación dinámica para el sostenimiento de sistemas de calidad. MCP-DIA. México, ITESM. 2003.

ROSALES, Javier. Estrategias didácticas. Instituto Tecnológico y de estudios Superiores de Monterrey. [Citado el 15 de junio de 2015]. Disponible en <www.itesm.mx>.

SHULER, Michael y KARGI, Fikret. *Bioprocess Engineering*. 2 ed. Hardcover, 1987 p 155-200.

TAPIAS, Heberto. Un ingeniero para el futuro de Colombia. Colombia, Ciencia y Tecnología. 1999 Vol 17 No. 02, p 2-4.

VARGAS, Eder., GUERRERO, Victor. "Elaboración de una herramienta informática para la estimación de costos de capital de equipos fundamentales en plantas de procesos químicos". (Trabajo de Grado) Bucaramanga, Colombia. Universidad Industrial de Santander. 2014.

ANEXO A: INTERFAZ GRÁFICA DE HERRAMIENTA DE CÁLCULO BIOSIM.

En este anexo se muestra la interfaz gráfica de cada una de las hojas electrónicas que componen la herramienta de cálculo BIOSIM.

Figura 1. Interfaz gráfica hoja electrónica de Excel “ESTEQUIOMETRÍA”. Para procesos aerobios de crecimiento microbiano.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: $1 \text{ Sustrato} + a \text{ O}_2 + b \text{ Base nitrogenada} \rightarrow c \text{ Biomasa} + d \text{ CO}_2 + e \text{ H}_2\text{O} + f \text{ Producto extracelular}$ Conoce la estequiometría de la Biomasa

Aerobia Crecimiento microbiano Formación de producto

Fórmula molecular	C	H	O	N
Componente				
Sustrato (S)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Oxígeno	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Base nitrogenada	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Biomasa (X)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
CO ₂	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
H ₂ O	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Producto extracelular (P)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Coefficiente de respiración (RQ)	Obligatorio			

CALOR DE RECCIÓN (kJ/kmol de S)

CALCULAR

CARGAR EJEMPLO RESET

Balance de la reacción	
Coeficiente estequiométrico	
a	
b	
c	
d	
e	
f	
Error	

Figura 2. Interfaz gráfica hoja electrónica de Excel “ESTEQUIOMETRÍA”. Para procesos aerobios de formación de producto.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: $1 \text{ Sustrato} + a \text{ O}_2 + b \text{ Base nitrogenada} \rightarrow c \text{ Biomasa} + d \text{ CO}_2 + e \text{ H}_2\text{O} + f \text{ Producto extracelular}$ Conoce la estequiometría de la Biomasa

Aerobia Crecimiento microbiano Formación de producto

Fórmula molecular	C	H	O	N
Componente				
Sustrato (S)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Oxígeno	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Base nitrogenada	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Biomasa (X)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
CO ₂	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
H ₂ O	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Producto extracelular (P)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Rendimiento producto/sustrato (Yps)				

CALOR DE RECCIÓN (kJ/kmol de S)

CALCULAR

CARGAR EJEMPLO RESET

Balance de la reacción	
Coeficiente estequiométrico	
a	
b	
c	
d	
e	
f	
Error	

La interfaz de las figuras 1 y 2, varían en el dato de coeficiente de respiración para crecimiento microbiano y rendimiento producto/sustrato para formación de producto.

Cuentan con dos listas desplegables para escoger el tipo de reacción y de biomasa, dos botones de opción para chequear si es crecimiento microbiano o formación de producto, una casilla de verificación para la estequiometría de la biomasa y tres botones de comando para calcular, cargar el ejemplo previamente montado y limpiar las casillas de datos.

Figura 5. Interfaz gráfica hoja electrónica de Excel “SIMULACIÓN Y DISEÑO” cuando se seleccionan dos datos conocidos.

Selecciones datos conocidos:	Y + D
Velocidad de dilución (D)	Valor Obligatorio h ⁻¹
Flujo (F)	Obligatorio m ³ /s
Volumen (V)	Obligatorio L
Sustrato en alimentación (S ₀)	Obligatorio g/L
Rendimiento biomasa/sustrato (Y _{X/S})	Obligatorio -
Rendimiento producto/sustrato (Y _{P/S})	Obligatorio -
Rendimiento producto/biomasa (Y _{P/X})	Obligatorio -
Coeficiente de saturación (K _S)	Obligatorio g/L
Velocidad específica de formación de producto (q _P)	Obligatorio h ⁻¹
Producto en alimentación (P ₀)	Obligatorio Kg/m ³
Mantenimiento celular (m _c)	Obligatorio h ⁻¹
Crecimiento celular (μ _m)	Obligatorio h ⁻¹
mantenimiento formación producto (m _p)	Obligatorio g ⁻¹
Biomasa en alimentación (X ₀)	Obligatorio g/L
Muerte celular (K _d)	Obligatorio h ⁻¹
Conversión de sustrato (S)	Obligatorio %

	Valor	Unidades
Biomasa	Velocidad de crecimiento (μ)	0,00E+00 g/h ³ /s
	Biomasa (X)	0,00 Kg/m ³
Sustrato	Velocidad de consumo de sustrato (r)	0,00E+00 Kg/m ³ /s
	Sustrato (S)	0,00 Kg/m ³
Producto	Velocidad de formación de producto (r _P)	0,00E+00 Kg/L/s
	Producto (P)	0,00 Kg/m ³
Productividad	Productividad de Biomasa (R _X)	0,0000 g/L/h
	Productividad de Producto (R _P)	0,0000 g/L/h
Subproductos	CO ₂	0,0000 Kg/m ³
	H ₂ O	0,0000 Kg/m ³

*Valores calculados a partir de estequiometría asociada

	Valor	Unidades
Energía	CALOR DE REACCIÓN	0,0 kJ/mol de S

	Valor	Unidades
Dimensionamiento	Altura (H)	=
	Diámetro (D)	0,00 cm
	Valor rebalado (H/D)	Obligatorio -

Figura 6. Interfaz gráfica hoja electrónica de Excel “SIMULACIÓN Y DISEÑO” cuando se seleccionan un solo dato conocido.

Selecciones datos conocidos:	Solo F
Velocidad de dilución (D)	Valor Obligatorio h ⁻¹
Flujo (F)	Obligatorio m ³ /s
Volumen (V)	Obligatorio L
Sustrato en alimentación (S ₀)	Obligatorio g/L
Rendimiento biomasa/sustrato (Y _{X/S})	Obligatorio -
Rendimiento producto/sustrato (Y _{P/S})	Obligatorio -
Rendimiento producto/biomasa (Y _{P/X})	Obligatorio -
Coeficiente de saturación (K _S)	Obligatorio g/L
Velocidad específica de formación de producto (q _P)	Obligatorio h ⁻¹
Producto en alimentación (P ₀)	Obligatorio Kg/m ³
Mantenimiento celular (m _c)	Obligatorio h ⁻¹
Crecimiento celular (μ _m)	Obligatorio h ⁻¹
mantenimiento formación producto (m _p)	Obligatorio g ⁻¹
Biomasa en alimentación (X ₀)	Obligatorio g/L
Muerte celular (K _d)	Obligatorio h ⁻¹
Conversión de sustrato (S)	Obligatorio %

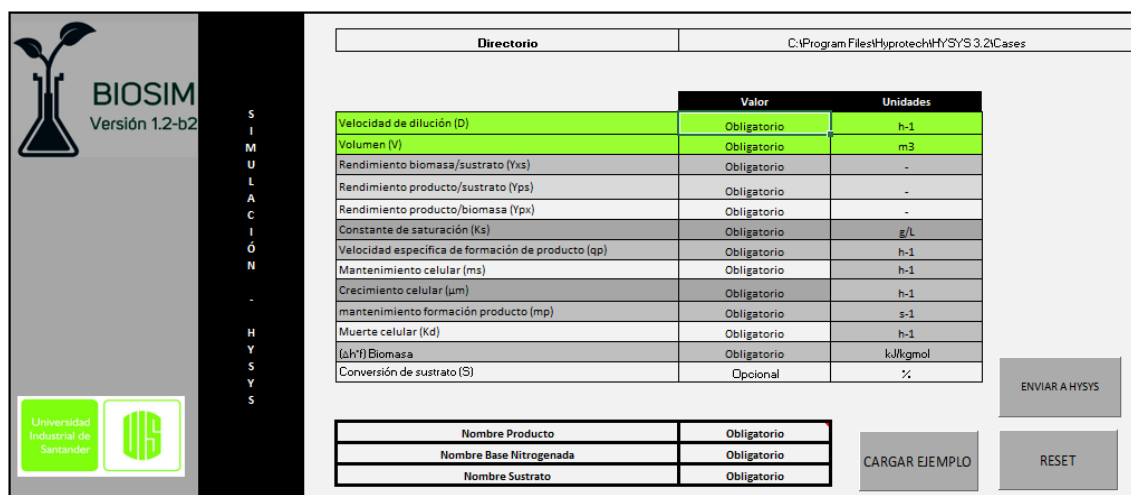
La interfaz de la Figura 6. Varía con respecto a la Figura 5, en la selección de los datos conocidos (lista desplegable), cuando se conoce solo una variable entre flujo (F), velocidad de dilución (D) y volumen (V), la tabla de la derecha (Figura 5) se oculta para poder realizar la variación de (D) (esta variación consiste en insertar un valor inicial y final de velocidad de dilución y un valor para el paso de la variación, se hace únicamente cuando se conoce solo el flujo o solo el volumen del biorreactor), después de escoger un valor para (D) e insertarlo en la casilla respectiva, la tabla se muestra para imprimir los resultados de la simulación. La interfaz de las Figuras 5 y 6. Cuenta con listas desplegables para seleccionar los datos conocidos y las unidades de medida, tres botones de comando que permiten realizar la simulación, cargar el ejercicio previamente montado y limpiar las casillas.

Figura 7. Interfaz gráfica de la hoja electrónica de Excel, cuando se hace la variación de velocidad de dilución.



La interfaz de la figura 7 cuenta con siete casillas de verificación que permiten escoger el gráfico que se quiera mostrar, un botón de comando que permite ocultar y/o mostrar los gráficos

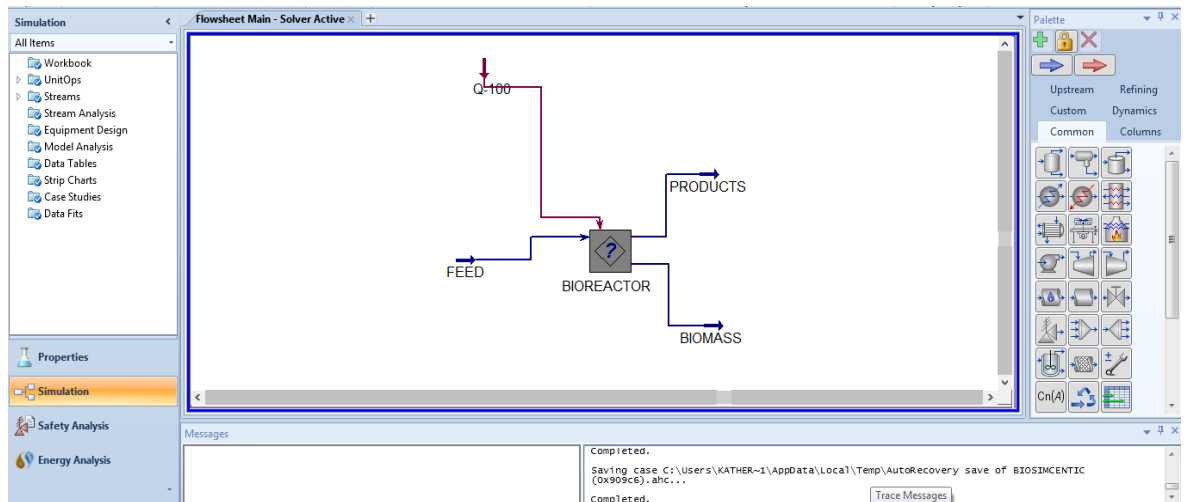
Figura 8. Interfaz gráfica hoja electrónica de Excel "HYSYS".



La Figura 8. Cuenta con listas desplegables para escoger las unidades de medida y tres botones de comando para enviar los datos a HYSYS una vez se

tenga toda la información requerida, uno para cargar un ejemplo previamente montado y uno para limpiar las casillas.

Figura 9. Vista de Aspen HYSYS “Simulation” cuando se ha realizado la simulación.



ANEXO B: EJERCICIOS DETALLADOS DE APLICACIÓN PARA LA HERRAMIENTA

EJERCICIO PARA ESTEQUIOMETRÍA Y CALOR DE REACCIÓN

- **Producción de biomasa celular a partir de glicerol.**

Se produce biomasa celular (bacteria) a partir de glicerol en un cultivo aerobio, utilizando amoníaco como fuente de nitrógeno. La reacción química se describe de la siguiente forma:



Con un coeficiente de respiración:

$$RQ = 0,42 = \frac{d}{a} \quad (1)$$

Determinar la estequiometría y el calor de la reacción.

Solución:

Para determinar los coeficientes estequiométricos, se realiza un balance por elementos de cada compuesto:

$$C: 3 = c + d \quad (2)$$

$$O: 3 + 2a = 0,47c + 2d + e \quad (3)$$

$$H: 8 + 3b = 1,74c + 2e \quad (4)$$

$$N: b = 0,24c \quad (5)$$

Se tiene un sistema de 5 ecuaciones y 5 incógnitas, se resuelve por cualquier método de solución de sistemas de ecuaciones lineales y se obtiene:

$$a(O_2) = 0,769$$

$$b(NH_3) = 0,642$$

$$c(CH_{1,74}O_{0,47}N_{0,24}) = 2,676$$

$$d(CO_2) = 0,323$$

$$e(H_2O) = 2,634$$

Para el calor de reacción, como es un proceso aerobio,

$$\Delta H^\circ_{rxn} = (\text{Electrones aceptados} * q) \quad \text{Ec. 5.}$$

$$(4 * 115)KJ = 460 KJ/gmol \text{ de } O_2 \text{ consumido}$$

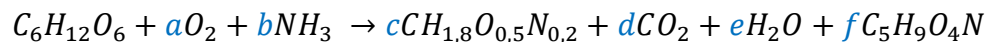
$$\Delta H^{\circ}_{rxn} = -460000 \frac{KJ}{Kmol \text{ de } O_2 \text{ consumido}} * 0,769 Kmol$$

$$\Delta H^{\circ}_{rxn} = -353740 \frac{KJ}{Kmol \text{ de Sustrato}}$$

EJERCICIO PARA ESTEQUIOMETRÍA Y CALOR DE REACCIÓN CON FORMACIÓN DE PRODUCTO.

- **Producción de ácido glutámico.**

Las células inmovilizadas de una cepa genéticamente mejorada de *Brevibacterium lactofermentum* se utilizan para convertir la glucosa en ácido glutámico para la producción de MSG (glutamato monosódico). Las células inmovilizadas son incapaces de crecer, pero metabolizan la glucosa de acuerdo con la ecuación:



Se toma la fórmula molecular de la literatura para la biomasa.

Determinar el calor de la reacción, si el rendimiento $Y_{p/s} = 0,067$.

Solución:

Para determinar los coeficientes estequiométricos, se realiza un balance por elementos de cada compuesto:

$$C: 6 = c + d + 5f \quad (1)$$

$$O: 6 + 2a = 0,5c + 2d + e + 4f \quad (2)$$

$$H: 12 + 3b = 1,8c + 2e + 9f \quad (3)$$

$$N: b = 0,2c + f \quad (4)$$

$$Y_{p/s} = \frac{f}{1} = 0,067 \quad (5)$$

Se tiene un sistema de 5 ecuaciones y 6 incógnitas, para resolverlo se plantea un algoritmo de solución y se obtiene:

$$a (O_2) = 1,933$$

$$b (NH_3) = 0,784$$

$$c (CH_{1,74}O_{0,47}N_{0,24}) = 3,586$$

$$d (CO_2) = 2,078$$

$$e(H_2O) = 3,647$$

$$f(C_5H_9O_4N) = 0,067$$

Para el calor de reacción, como es un proceso aerobio,

$$\Delta H^\circ_{rxn} = (\text{Electrones aceptados} * q) \quad \text{Ec. 5.}$$

$$(4 * 115)KJ = 460 KJ/gmol \text{ de } O_2 \text{ consumido}$$

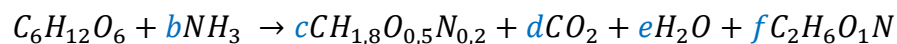
$$\Delta H^\circ_{rxn} = -460000 \frac{KJ}{Kmol \text{ de } O_2 \text{ consumido}} * 1,933 Kmol$$

$$\Delta H^\circ_{rxn} = -889180 \frac{KJ}{Kmol \text{ de Sustrato}}$$

EJERCICIO PARA AJUSTE DE PARÁMETROS Y SIMULACIÓN Y DISEÑO

• Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Se estudia la fermentación continua en un fermentador tipo tanque agitado de 1L de capacidad utilizando una cepa de *Saccharomyces Cerevisiae* altamente resistente al etanol. Se opera a 30°C durante todo el proceso en estricta anaerobiosis con disoluciones glucosadas de 200 g/L. (Se sigue el modelo de Monod). La alimentación es estéril ($X_0 = 0$).



- Velocidad de dilución = $0,030 (h^{-1})$ (en este valor de D se representa la mayor productividad de producto), Volumen = 1 L. Crecimiento celular ($\mu_{m\acute{a}x}$) = $0,0352 (h^{-1})$. Constante de saturación (K_s) = $8,834 \frac{g}{L}$. Calor de formación de la biomasa = $1700000 \frac{KJ}{Kmol}$.
- El mantenimiento celular (m_s) es prácticamente nulo, lo que indica que apenas se utiliza sustrato para el mantenimiento celular una vez alcanzado el estado estacionario.
- Rendimiento producto/sustrato (Y_{ps}) = 0,4928.
- Rendimiento biomasa/sustrato (Y_{xs}) = 0,067.
- Rendimiento producto/biomasa (Y_{px}) = 7,8.
- La relación altura/diámetro del biorreactor es de 1,5.

Los valores experimentales de Biomasa (X), Producto (P) y Sustrato (S) para diferentes velocidades de dilución (D), se encuentran expuestas en la siguiente tabla:

D (h^{-1})	S (g/L)	X (g/L)	P (g/L)
0,0132	5,30	12,85	88,84
0,0256	23,56	11,65	84,78
0,0262	25,72	11,50	83,85
0,0274	31,03	11,15	81,48
0,0300	50,96	9,84	72,17
0,0315	75,21	8,24	60,57

Solución de la estequiometría

$$C: 6 = c + d + 2f \quad (1)$$

$$O: 6 = 0,5c + 2d + e + f \quad (2)$$

$$H: 12 + 3b = 1,8c + 2e + 6f \quad (3)$$

$$N: b = 0,2c + f \quad (4)$$

Se tiene un sistema de 4 ecuaciones y 5 incógnitas, para resolverlo se plantea un algoritmo de solución y se obtiene:

$$b (NH_3) = 0,166$$

$$c (CH_{1,74}O_{0,47}N_{0,24}) = 0,831$$

$$d (CO_2) = 1,751$$

$$e (H_2O) = 0,374$$

$$f (C_2H_6O_1) = 1,709$$

Para el calor de reacción, como es un proceso anaerobio, entonces se aplica la Ec. 6.

$$\Delta H^\circ_{rxn} = (n\Delta h^\circ_c)_{sust.} + (n\Delta h^\circ_c)_{base\ nit} - (n\Delta h^\circ_c)_{biom.} - (n\Delta h^\circ_c)_{prod.}$$

$$\begin{aligned} \Delta H^\circ_{rxn} &= \left(1 \text{ Kmole} * -2805000 \frac{KJ}{\text{Kmole}} \right) + \left(0,166 \text{ Kmole} * -382600 \frac{KJ}{\text{Kmole}} \right) \\ &\quad - \left(0,831 \text{ Kmole} * -521520 \frac{KJ}{\text{Kmole}} \right) \\ &\quad - \left(1,709 \text{ Kmole} * -1240000 \frac{KJ}{\text{Kmole}} \right) \\ \Delta H^\circ_{rxn} &= -324405 \frac{KJ}{\text{Kmole de S}} \end{aligned}$$

Solución para ajuste de parámetros

Balance de biomasa:

$$FX_0 - FX + r_x V = 0 \quad Ec. 7.$$

Que viene dado por la siguiente ecuación:

$$D = \frac{\mu_{m\acute{a}x} * S}{K_s + S} \quad Ec. 8.$$

Teniendo en cuenta que: $D = \frac{F}{V}$ Ec. 9.

Invirtiendo la ecuación de Monod se tiene la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{D + K_d} = \frac{K_s}{\mu_{m\acute{a}x}} \left(\frac{1}{S} \right) + \frac{1}{\mu_{m\acute{a}x}} \quad Ec. 10.$$

Balance de sustrato:

$$FS_0 - FS - r_s V = 0 \quad Ec. 11.$$

$$D(S_0 - S) - r_s = 0 \quad Ec. 12.$$

$$r_s = q_s X = 0 \quad Ec. 13.$$

Teniendo en cuenta que: $q_s = \left[\frac{D}{Y_{xs}} \right] + m_s$, se reemplaza en la Ec. 13.

$$D \left[\frac{S - S_0}{X} \right] = \frac{D}{Y_{xs}} + m_s \quad Ec. 14.$$

El rendimiento observado está determinado por: $Y'_{xs} = \frac{X}{S_0 - S}$, reemplazándolo en la Ec. 14. y haciendo las respectivas modificaciones matemáticas, se obtiene:

$$\frac{1}{Y'_{xs}} = \frac{1}{Y_{xs}} + m_s \left(\frac{1}{S} \right) \quad Ec. 15.$$

Balance de producto:

$$FP_0 - FP + r_p V = 0 \quad Ec. 16.$$

$$r_p = (D * Y_{px} + m_p) X \quad Ec. 17.$$

$\frac{1}{D+K_d} (h^{-1})$	S (g/L)	X (g/L)	$\frac{1}{Y'_{xs}}$	$\frac{1}{S}$
75,75	5,30	12,85	15,15	0,18
39,06	23,56	11,65	15,14	0,04
38,17	25,72	11,50	15,15	0,04
36,49	31,03	11,15	15,15	0,03
33,33	50,96	9,84	15,14	0,02

31,75	75,21	8,24	15,14	0,01
-------	-------	------	-------	------

Resolviendo la Ec. 15. por linealización, se encuentra el valor de m_s .

$$m_s = 4,91 \times 10^{-5} h^{-1}$$

$$Y_{xs} = 0,0666$$

Resolviendo la Ec. 10. por linealización, se encuentra el valor de K_s y $\mu_{m\acute{a}x}$.

$$\mu_m = 0,035 h^{-1}$$

$$K_s = 8,84 g/L$$

Solución para simulación y diseño

De la ecuación de Monod, se despeja S:

$$D = \frac{\mu_{m\acute{a}x} * S}{K_s + S} \quad \text{Ec. 8.}$$

$$0,03(h^{-1}) = \frac{0,035(h^{-1}) * S}{8,84 (g/L) + S}$$

$$S = 53,04 g/L$$

Reemplazando y despejando del balance de sustrato, se obtiene:

$$FS_0 - FS - r_s V = 0 \quad \text{Ec. 11.}$$

$$D(S_0 - S) - r_s = 0 \quad \text{Ec. 12.}$$

$$r_s = q_s X = 0 \quad \text{Ec. 13.}$$

$$q_s = \left[\frac{D}{Y_{xs}} \right] + m_s$$

$$q_s = \left[\frac{0,03 (h^{-1})}{0,066} \right] + 4,92 \times 10^{-5} (h^{-1}) = 0,45 h^{-1}$$

Sustituyendo en la Ec. 12:

$$D(S_0 - S) - r_s = 0$$

$$0,03 (h^{-1}) * \left(200 \left(\frac{g}{L} \right) - 53,04 \left(\frac{g}{L} \right) \right) = r_s$$

$$r_s = 4,40 h^{-1} * \frac{g}{L}$$

Conociendo el valor de q_s y r_s , se reemplaza en la Ec. 13. Obteniéndose el valor de biomasa: $r_s = q_s X = 0$

$$\frac{4,40 \text{ h}^{-1} * \frac{\text{g}}{\text{L}}}{0,45 \text{ h}^{-1}} = X = 9,7 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

Finalmente, del balance de producto Ec. 16.:

$$FP_0 - FP + r_p V = 0$$

$$r_p = (D * Y_{px} + m_p) X$$

$$r_p = (0,03 (\text{h}^{-1}) * 7,8 + 0) * 9,7 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

$$r_p = 2,27 \text{ h}^{-1} * \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

Despejando la ecuación de balance de producto, se obtiene P:

$$-DP + r_p = 0$$

$$P = \frac{-2,27 (\text{h}^{-1} * \frac{\text{g}}{\text{L}})}{-0,03 (\text{h}^{-1})} = 75,66 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

Resultados:

Velocidad de dilución (h^{-1})	Biomasa ($\frac{\text{g}}{\text{L}}$)	Sustrato ($\frac{\text{g}}{\text{L}}$)	Producto ($\frac{\text{g}}{\text{L}}$)
0,03	9,7	53,04	75,6

ANEXO C: EJERCICIOS DE APLICACIÓN RESUELTOS POR LA HERRAMIENTA

- Producción de biomasa celular a partir de glicerol.

Figura 1. Ejercicio de crecimiento microbiano resuelto por la herramienta.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: 1 Sustrato + 0 O₂ + 0 Base nitrogenada → c Biomasa + d CO₂ + e H₂O + f Producto extracelular

Conoce la estequiometría de la Biomasa: Bacteria

Aerobia Crecimiento microbiano Formación de producto

Fórmula molecular					
Componente	C	H	O	N	
Sustrato (S)	3	8	3	0	
Oxígeno	0	0	2	0	
Base nitrogenada	0	3	0	1	
Biomasa (X)	1	1,74	0,47	0,24	
CO ₂	1	0	2	0	
H ₂ O	0	2	1	0	
Producto extracelular (P)	0	0	0	0	
Coefficiente de respiración (RQ)	0,42				

CALOR DE RECCIÓN (kJ/kmol de S) -354093,8

CALCULAR

Balance de la reacción	
	Coefficiente estequiométrico
a	0,77
b	0,64
c	2,68
d	0,32
e	2,63
f	0,00
Error	1,8E-14

- Producción de ácido glutámico.

Figura 2. Ejercicio de formación de producto resuelto por la herramienta.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: 1 Sustrato + 0 O₂ + 0 Base nitrogenada → c Biomasa + d CO₂ + e H₂O + f Producto extracelular

Conoce la estequiometría de la Biomasa: Bacteria

Aerobia Crecimiento microbiano Formación de producto

Fórmula molecular					
Componente	C	H	O	N	
Sustrato (S)	6	12	6	0	
Oxígeno	0	0	2	0	
Base nitrogenada	0	3	0	1	
Biomasa (X)	1	1,8	0,5	0,2	
CO ₂	1	0	2	0	
H ₂ O	0	2	1	0	
Producto extracelular (P)	5	9	4	1	

Rendimiento producto/sustrato (Yps) 0,067

CALOR DE RECCIÓN (kJ/kmol de S) -889228,2

CALCULAR

Balance de la reacción	
	Coefficiente estequiométrico
a	1,93
b	0,78
c	3,59
d	2,08
e	3,65
f	0,07
Error	3,7E-12

- Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Figura 3. Ejercicio de ajuste de parámetros cinéticos resuelto por la herramienta.

Tabla de datos			Parámetros		Unidades
Velocidad de dilución	Sustrato	Biomasa	Sustrato inicial (S ₀)	200	g/L
h ⁻¹	g/L	g/L	Rendimiento biomasa/sustrato (Y _{xs})	6,60E-02	-
0,0132	5,3	12,85	Mantenimiento celular (m _s)	4,91E-05	h ⁻¹
0,0256	23,56	11,65	Muerte celular (K _d)	3,24E-06	h ⁻¹
0,0262	25,572	11,5	Crecimiento celular máximo (μ _m)	3,52E-02	h ⁻¹
0,0274	31,03	11,15	Constante de saturación (K _s)	8,84E+00	g/L
0,03	50,96	9,84	Error ajuste Biomasa	0,0065	-
0,0315	75,21	8,24	Error ajuste Sustrato	0,1148	-

Mostrar gráfico

Figura 6. Ejercicio de simulación y diseño para HYSYS. Hoja electrónica de “ESTEQUIOMETRÍA” para calcular los coeficientes estequiométricos y el calor de la reacción.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: 1 Sustrato + 0 O₂ + 0 Base nitrogenada → c Biomasa + d CO₂ + e H₂O + f Producto extracelular

Formula molecular

Componente	C	H	O	N	Calor de combustión (Δh°c) [kJ/kmol]
Sustrato (S)	6	12	6	0	-2,81E+06
Base nitrogenada	0	3	0	1	-382600
Biomasa (X)	1	1,8	0,5	0,2	-521520
CO ₂	1	0	2	0	0
H ₂ O	0	2	1	0	0
Producto extracelular (P)	2	6	1	0	-1,24E+06

Balance de la reacción

	Coefficiente estequiométrico
b	0,17
c	0,83
d	1,75
e	0,37
f	1,71
Error	4,2E-17

Calor de reacción [kJ/kmol de S]: -324405.1

CALCULAR

Figura 7. Datos de alimentación para HYSYS del ejercicio de simulación y diseño.

	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	0,03	h-1
Volumen (V)	33,33	m3
Rendimiento biomasa/sustrato (Yxs)	0,0664	-
Rendimiento producto/sustrato (Yps)	0,4928	-
Rendimiento producto/biomasa (Ypx)	7,8	-
Constante de saturación (Ks)	8,834	g/L
Velocidad específica de formación de producto (qp)	0,223	h-1
Mantenimiento celular (ms)	0,0000491	h-1
Crecimiento celular (μm)	0,0352	h-1
mantenimiento formación producto (mp)	0	s-1
Muerte celular (Kd)	0,00000324	h-1
(Δh°f) Biomasa	1,70E+06	kJ/kgmol
Conversión de sustrato (S)		%

ENVIAR A HYSYS

Nombre Producto	Ethanol
Nombre Base Nitrogenada	Ammonia
Nombre Sustrato	Dextrose

CARGAR EJEMPLO

RESET

Figura 8. Corriente de alimentación en Aspen HYSYS para el ejercicio de simulación.

Material Stream: FEED

Worksheet	Stream Name	FEED	Vapour Phase	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0641	0,0641	0,9359
Properties	Temperature [C]	25,00	25,00	25,00
Composition	Pressure [bar_g]	-3,250e-003	-3,250e-003	-3,250e-003
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	1,187	7,613e-002	1,111
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	183,2	1,296	181,9
User Variables	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1576	2,104e-003	0,1555
Notes	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-7,893e+004	-4,571e+004	-8,121e+004
Cost Parameters	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-54,38	209,0	-72,43
Normalized Yields	Heat Flow [kJ/h]	-9,369e+004	-3480	-9,021e+004
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	6,840e-002	2,117e-003	6,344e-002
	Fluid Package	Basis-1		
	Utility Type			

OK

Delete Define from Stream... View Assay

Figura 9. User Unit Operation en Aspen HYSYS para el ejercicio de simulación.

Name	FEED	PRODUCTS	BIOMASS	Q-100
Vapour	0,0641	0,4337	0,0000	<empty>
Temperature [C]	25,00	25,00	25,00	<empty>
Pressure [bar_g]	-3,250e-003	-3,250e-003	-3,250e-003	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	1,187	3,239	0,3276	<empty>
Mass Flow [kg/h]	183,2	175,1	8,060	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1576	0,1958	1,151e-002	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-7,893e+004	-3,003e+005	1,820e+006	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-54,38	92,87	1,402e+005	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	-9,369e+004	-9,727e+005	5,963e+005	2,827e+005

Figura 10. Corriente de energía en Aspen HYSYS para el ejercicio de simulación.

Stream Name	Q-100
Heat Flow [kJ/h]	3,22e+005
Ref. Temperature [C]	<empty>
Utility Type	
Utility Mass Flow [kg/h]	<empty>

Figura 11. Corriente de producto en Aspen HYSYS para el ejercicio de simulación.

Stream Name	PRODUCTS		
	Vapour Phase	Liquid Phase	
Vapour / Phase Fraction	0,4337	0,4337	0,5663
Temperature [C]	25,00	25,00	25,00
Pressure [bar_g]	-3,250e-003	-3,250e-003	-3,250e-003
Molar Flow [kgmole/h]	3,239	1,405	1,834
Mass Flow [kg/h]	175,1	60,04	115,0
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1958	7,329e-002	0,1225
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-3,003e+005	-3,687e+005	-2,480e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	92,87	211,1	2,347
Heat Flow [kJ/h]	-9,727e+005	-5,178e+005	-4,548e+005
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0,1623	6,741e-002	0,1069
Fluid Package	Basis-1		
Utility Type			

Figura 12. Corriente de Salida de biomasa en Aspen HYSYS para el ejercicio de simulación.

Stream Name	BIOMASS	
	Vapour	Solid Phase
Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Temperature [C]	25,00	25,00
Pressure [bar_g]	-3,250e-003	-3,250e-003
Molar Flow [kgmole/h]	0,3276	0,3276
Mass Flow [kg/h]	8,060	8,060
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1,151e-002	1,151e-002
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	1,820e+006	1,820e+006
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	1,402e+005	1,402e+005
Heat Flow [kJ/h]	5,963e+005	5,963e+005
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	1,151e-002	1,151e-002
Fluid Package	Basis-1	
Utility Type		

Los resultados de los cálculos realizados en cada una de las hojas electrónicas de Excel y en Aspen HYSYS para los ejercicios propuestos fueron muy aproximados con respecto a los cálculos manuales. Lo que confirma la validez de la herramienta de cálculo BIOSIM.

ANEXO D: FORMATO DE ENCUESTA DE ACEPTACIÓN DE LA HERRAMIENTA

ENCUESTA DE SATISFACCIÓN DE LA HERRAMIENTA DE CÁLCULO "BIOSIM"

Usuario:

Nos es de interés conocer su opinión acerca de la calidad de la herramienta de cálculo "BIOSIM". Por tanto, solicitamos amablemente responder la siguiente encuesta.

***Obligatorio**

1. 1. ¿Cómo califica el desempeño de la herramienta de cálculo "BIOSIM"? *

Marca solo un óvalo por fila.

	Muy bueno	Bueno	Regular	Malo	Muy malo
Facilidad de uso	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Utilidad de la herramienta	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Organización	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Versatilidad	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

2. 2. Para usted como usuario de "BIOSIM": *

Marca solo un óvalo por fila.

	Muy de acuerdo	De acuerdo	Poco de acuerdo	Nada de acuerdo
La herramienta es clara y precisa	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
La interfaz es amigable	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Satisface sus necesidades	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>
Es efectiva	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>

3. 3. ¿Qué dificultades encontró al hacer uso de la herramienta? *

Marca solo un óvalo.

- Demora en el tiempo de cálculo y respuesta
- Pocas unidades de medida
- No calculó la respuesta solicitada
- Los datos requeridos por la herramienta no fueron claros
- No encontré ninguna dificultad
- Otro. ¿Cuál?

4. 4. Considera que ¿la herramienta "BIOSIM" es útil para la asignatura de Bioprocesos? *

Marca solo un óvalo.

- Muy útil
- Parcialmente útil
- Poco útil
- Nada útil

5. ¿Utilizaría la herramienta de cálculo "BIOSIM" para la simulación de biorreactores en continuo, en su vida laboral? *

Marca solo un óvalo.

- SI
- NO
- Quizás

6. SUGERENCIAS

Con la tecnología de  Google Forms

ANEXO E: MANUAL DEL USUARIO – BIOSIM.

HERRAMIENTA DE CÁLCULO PARA LA SIMULACIÓN DE BIORREACTORES EN CONTINUO

INTRODUCCIÓN

La herramienta “BIOSIM” tiene como finalidad tres objetivos de cálculo; el primero es útil para estimar la estequiometría y calor de reacción de procesos aerobios y anaerobios, la segunda opción permite llevar a cabo el ajuste de los parámetros cinéticos del proceso, finalmente, la herramienta permite realizar la simulación en Excel y Aspen Hysys y un diseño básico para los biorreactores (solo en Excel). Los biorreactores trabajan en continuo e involucran una sola fase en la corriente de alimentación.

1. PASOS PREVIOS PARA EJECUTAR “BIOSIM”

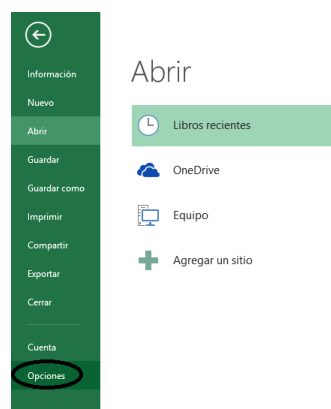
En la carpeta de la herramienta de cálculo “BIOSIM” se encuentran tres archivos, uno con el nombre “BIOSIM.xlsm” (Excel), un segundo archivo con el nombre “BIOSIM.HSC” (Aspen HYSYS) y un archivo final con el nombre “Hysys.tlb”.

1.1. Abrir los programas Microsoft Excel y Aspen HYSYS.

1.2. Inicialmente, Microsoft Excel debe tener habilitado el complemento “solver” y el desarrollador para poder ejecutar la herramienta de cálculo.

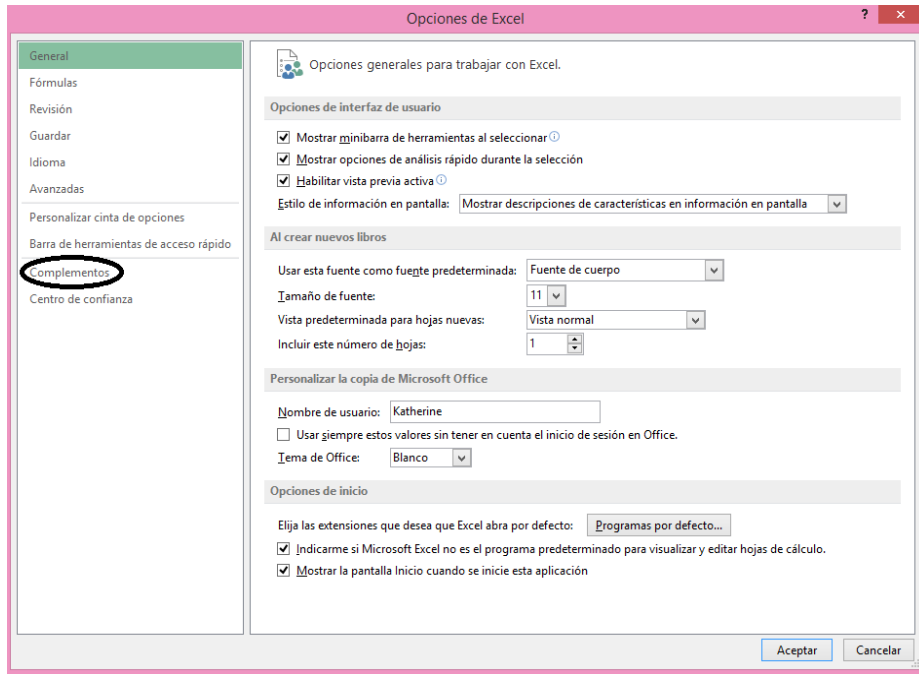
- Para activar “solver”, dar clic en ARCHIVO e ir a OPCIONES.

Figura 1. Opciones de Excel



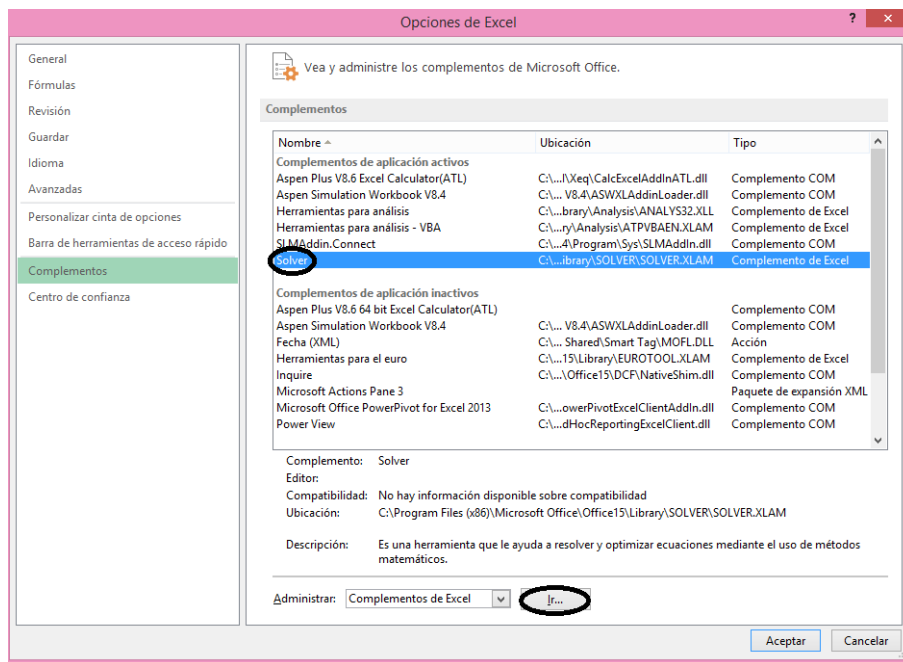
- En la ventana “Opciones de Excel”, selecciona “complementos”.

Figura 2. Opción complemento de Excel



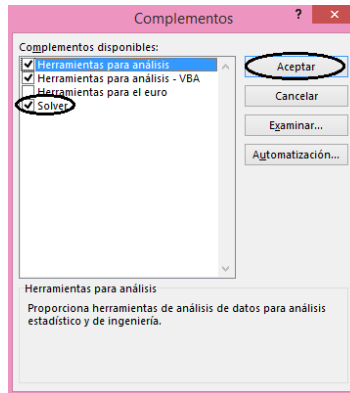
- Seleccionar Solver y dar clic en Ir...

Figura 3. Opción Solver dentro de los complementos de Excel.



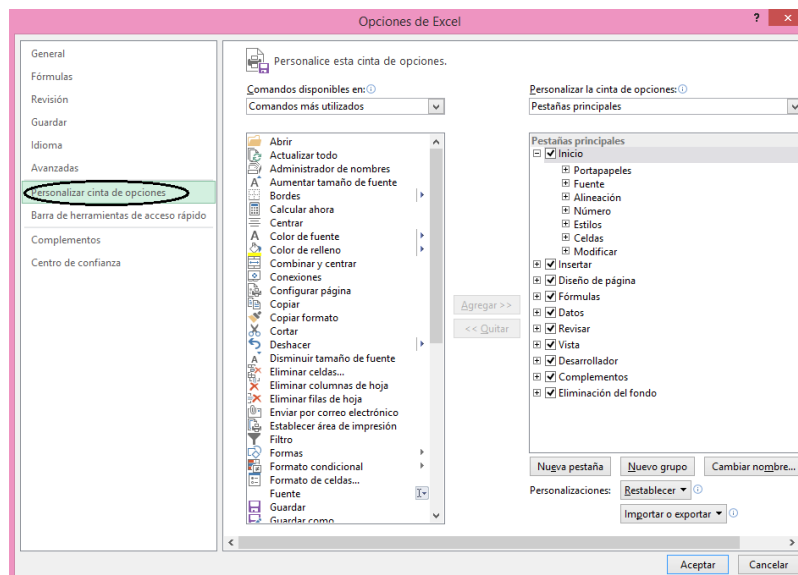
- Se selecciona el recuadro del solver y finalmente, Aceptar.

Figura 4. Activación de Solver para Excel.



- Para activar “desarrollador” dar clic en ARCHIVO e ir a OPCIONES.
- En la ventana “Opciones de Excel” selecciona “Personalizar cinta de opciones”.

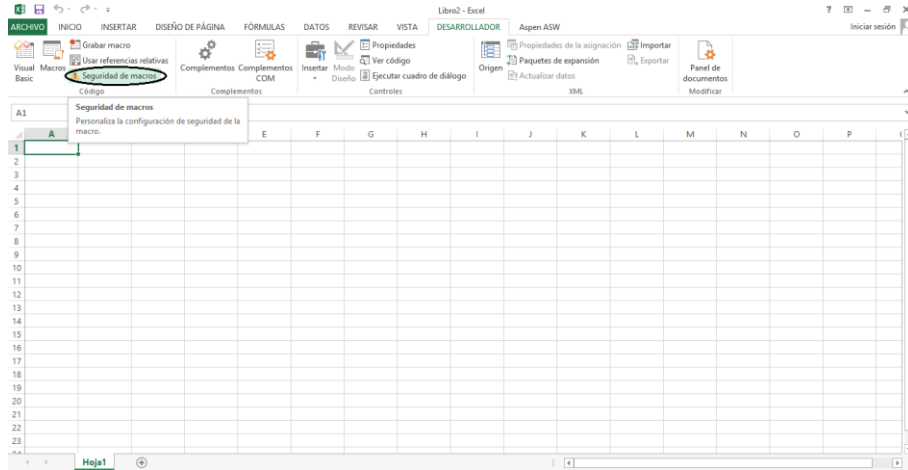
Figura 5. Opción Personalizar cinta de opciones de Excel.



- Seleccionar “Desarrollador de la lista “Comandos disponibles en:” y dar clic en agregar. Inmediatamente aparecerá en la lista de “Pestañas principales” y se chequea la casilla del desarrollador. Finalmente se da clic en aceptar.

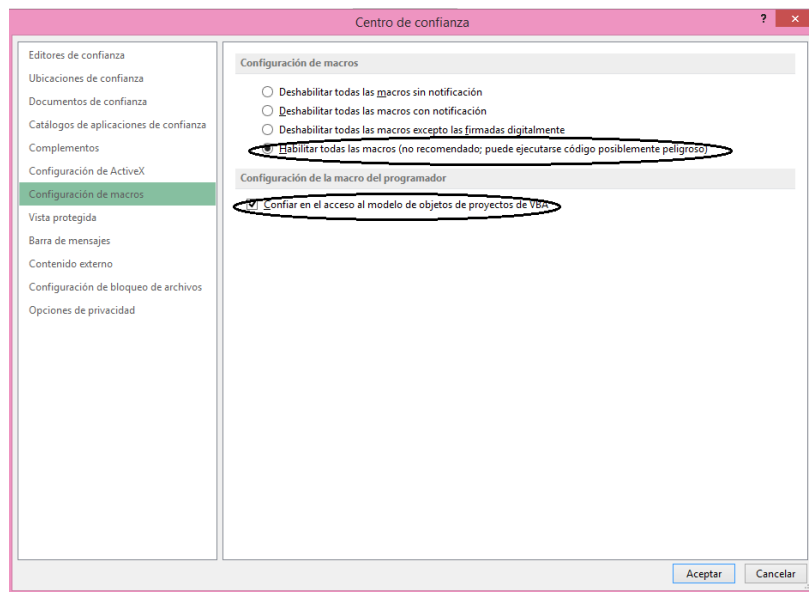
- Después de activo el desarrollador, aparecerá en la cinta de opciones del libro de Excel. Se da clic sobre él y se selecciona “Seguridad de macros”.

Figura 6. Desarrollador de Excel. Seguridad de macros.



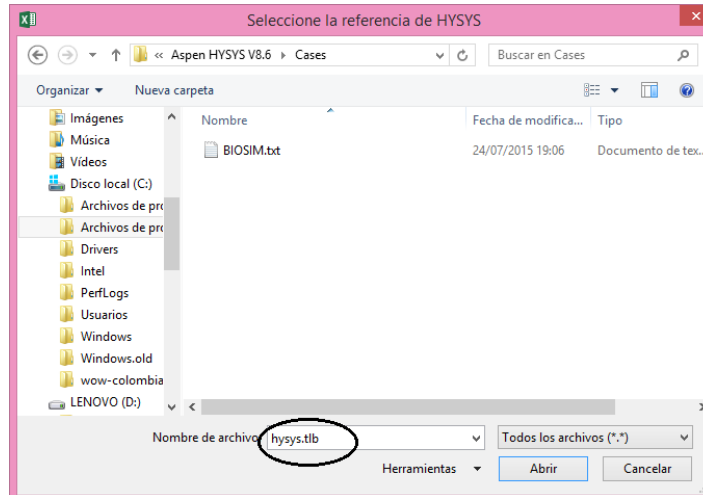
- En la ventana “Centro de confianza” chequear la casilla de “Habilitar todas las macros” y “Confiar en el acceso al modelo de objetos de proyectos de VBA”. Y dar clic en Aceptar. Sobre la carpeta “CASES”, dar clic derecho, “Propiedades”, en la pestaña seguridad hacer clic en “Editar”, seleccionar el usuario y chequear la casilla Permitir “Control total”, “Aceptar” y aplicar cambios.

Figura 7. Centro de confianza, habilitar todas las macros.



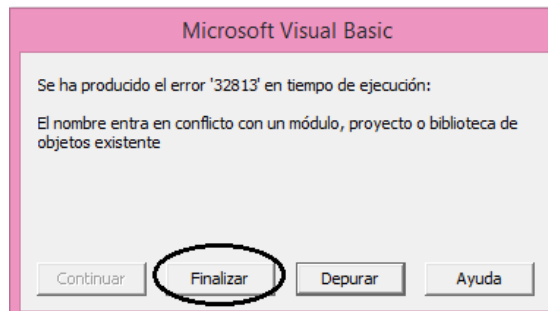
- 1.3. Se procede a abrir el archivo que contiene la herramienta de cálculo “BIOSIM” de Excel. Inmediatamente aparecerá una ventana llamada “Seleccione la referencia de HYSYS”.

Figura 8. Ventana: Seleccione la referencia de HYSYS.



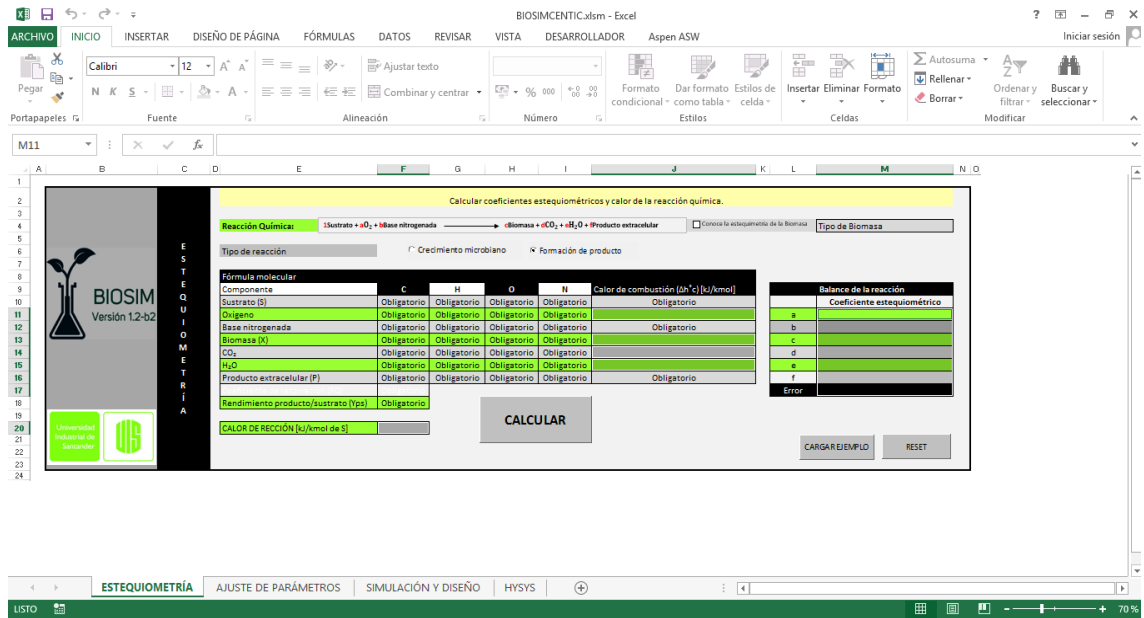
- Se selecciona el archivo Hysys.tlb en la carpeta donde se haya guardado y dar clic en abrir. Esto se hace con el fin de evitar errores en el funcionamiento del programa ya sea por las versión de Aspen HYSYS o por no tener instalado dicho programa en el ordenador.
- En el caso en que ya se haya realizado el anterior procedimiento y el usuario lo repita, saldrá un aviso de Error para confirmar que ya se ha cumplido con el procedimiento previo. Dar clic en finalizar.

Figura 9. Ventana de error.



- 1.4. Después de activado el solver, se procede a abrir la herramienta de cálculo “BIOSIM”. La interfaz se verá de la siguiente manera:

Figura 10. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM.



2. MANEJO DE LA HERRAMIENTA DE CÁLCULO.

En la hoja de cálculo de “Estequiometría” se realiza el balance de masa con los componentes de la reacción, encontrando el calor requerido o suministrado a la misma para que se lleve a cabo. Así mismo, en la hoja “Ajuste de parámetros” por medio de la linealización, la herramienta calcula el valor que más se adapte al proceso de determinadas variables, la sección de “Simulación y diseño” BIOSIM estima los datos de sustrato, biomasa y producto que se generan, junto con el dimensionamiento del biorreactor. Finalmente en la hoja “Hysys”, se introducen los datos conocidos de los parámetros cinéticos conocidos del proceso y se envían a Aspen Hysys para realizar la simulación.

2.1. Estequiometría y calor de reacción:

2.1.1. **Crecimiento microbiano** (se chequea la casilla de verificación que lo indica): Evidencia la formación de biomasa en la fermentación.

- Se selecciona de la lista desplegable si el proceso es aerobio (presencia de oxígeno) o anaerobio (sin presencia de oxígeno).
- Es necesario conocer la fórmula molecular de cada uno de los compuestos que participan en la reacción química de crecimiento microbiano (sustrato, oxígeno, base nitrogenada, biomasa, dióxido de carbono y agua).
- Si se conoce la fórmula molecular de la biomasa, se debe seleccionar el recuadro “conoce la estequiometría de la biomasa”, escoger de la lista desplegable el tipo de biomasa que se usa en el proceso y llenar las casillas con los datos que exige la herramienta. En el caso en que no se conozca la biomasa, el programa toma la fórmula molecular de la biomasa expresado en la literatura, dependiendo de si es bacteria o levadura que tienen la misma fórmula molecular pero diferente calor de combustión.

Figura 11. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, selección del tipo de biomasa, crecimiento microbiano.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: $1\text{Sustrato} + a\text{O}_2 + b\text{Base nitrogenada} \rightarrow c\text{Biomasa} + d\text{CO}_2 + e\text{H}_2\text{O} + f\text{Producto extracelular}$ Conoce la estequiometría de la Biomasa

Tipo de reacción: Crecimiento microbiano Formación de producto

Tipo de Biomasa:

Fórmula molecular					
Componente	C	H	O	N	Calor de combustión ($\Delta h^{\circ}c$) [kJ/kmol]
Sustrato (S)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Oxígeno	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Base nitrogenada	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Biomasa (X)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
CO ₂	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
H ₂ O	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Producto extracelular (P)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Coefficiente de respiración (RQ)	Obligatorio				

CALOR DE RECCIÓN [kJ/kmol de S]

CALCULAR

Balance de la reacción	
	Coefficiente estequiométrico
a	
b	
c	
d	
e	
f	
Error	

- Para los demás compuestos, se ingresan los átomos de carbono, hidrógeno y nitrógeno que los conforman así como su calor de combustión para procesos anaerobios; se debe incluir también el dato extra de coeficiente de respiración (RQ) si el proceso es aerobio junto con los átomos de oxígeno, para que la herramienta realice el balance de la reacción, indique el coeficiente estequiométrico que la compone y calcule un valor de calor de reacción, al dar clic en el botón “CALCULAR”.

* El valor calculado de calor de reacción se expresará en la hoja de “estequiometría” así como en la de “simulación y diseño” (celda M18).

* Todas las casillas de la tabla “Fórmula molecular” deben ser llenadas con un valor; en el caso en que el compuesto no tenga átomos de C, O, H o N, se pone el valor cero dentro de ella.

Figura 12. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, cálculo de calor y balance de la reacción, crecimiento microbiano.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: Sustrato + O₂ + Base nitrogenada → Biomasa + CO₂ + H₂O + Producto extracelular

Tipos de reacción: Aerobia, Crecimiento microbiano, Formación de producto

Componente	C	H	O	N	Calor de combustión (kJ/mol)
Sustrato (S)	3	8	3	0	-385900
Oxígeno	0	0	2	0	0
Base nitrogenada	0	3	0	1	-382600
Biomasa (X)	1	1,74	0,47	0,24	-57184
CO ₂	1	0	2	0	0
H ₂ O	0	2	1	0	0
Producto extracelular (P)	0	0	0	0	0
Coefficiente de respiración (RQ)	0,42				

CALOR DE REACCIÓN (kJ/mol de S): -37238,5

Balance de la reacción

Componente	Coefficiente estequiométrico
a	0,77
b	0,64
c	2,68
d	0,32
e	3,63
f	0,00
Error	1,8E-14

Botones: CALCULAR, CARGAR EJEMPLO, RESET

* Si se quiere iniciar un nuevo cálculo, se da clic en el botón “RESET” que se encarga de limpiar las casillas y las deja vacías.

* Para ver un ejemplo de los cálculos realizados por la herramienta, se da clic en el botón “CARGAR EJEMPLO”, para mostrar un ejercicio ya resuelto como prueba, para ver los resultados, dar clic en el botón “CALCULAR”.

2.1.2. Formación de producto: (se chequea la casilla de verificación que lo indica): En los bioprocesos siempre hay formación de biomasa o diversos productos extracelulares que influirán en la estequiometría de la reacción.

Se realiza el mismo proceso propuesto para el crecimiento microbiano, con la diferencia que en este caso no se necesita el dato de “Coeficiente de respiración (RQ)” para procesos aerobios, sino un valor para la casilla de “Rendimiento producto/sustrato (Yp/s)”, además de conocer la fórmula molecular del producto.

* Todos las casillas de la tabla “Fórmula molecular” deben ser llenadas con un valor; en el caso en que el compuesto no tenga átomos de C, H, O o N, se pone el valor cero dentro de ella.

Figura 13. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, formación de producto.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: Sustrato + O₂ + Base nitrogenada → Biomasa + CO₂ + H₂O + Producto extracelular

Tipos de reacción: Aerobia, Crecimiento microbiano, Formación de producto

Componente	C	H	O	N	Calor de combustión (kJ/mol)
Sustrato (S)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Oxígeno	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Base nitrogenada	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Biomasa (X)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
CO ₂	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
H ₂ O	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Producto extracelular (P)	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio	Obligatorio
Rendimiento producto/sustrato (Yp/s)	Obligatorio				

CALOR DE REACCIÓN (kJ/mol de S):

Balance de la reacción

Componente	Coefficiente estequiométrico
a	
b	
c	
d	
e	
f	
Error	

Botones: CALCULAR, CARGAR EJEMPLO, RESET

* El valor calculado de calor de reacción se expresará en la hoja “estequiometría” así como en la de “simulación y diseño” celda (M18).

* Si se quiere iniciar un nuevo cálculo, se da clic en el botón “RESET” que se encarga de limpiar las casillas y las deja vacías.

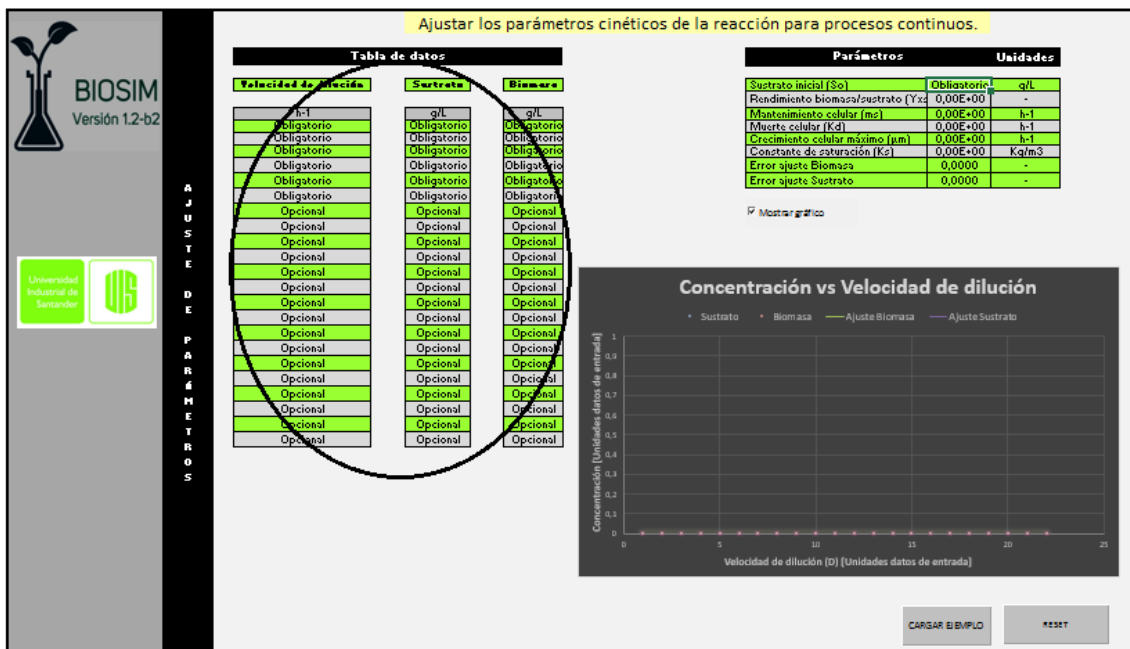
* Para ver un ejemplo de los cálculos realizados por la herramienta, se da clic en el botón “CARGAR EJEMPLO”, para mostrar un ejercicio ya resuelto como prueba, para ver los resultados, dar clic en el botón “CALCULAR”.

2.2. Ajuste de parámetros

Se encarga de encontrar el valor adecuado de los parámetros cinéticos a una serie de datos de velocidad de dilución, sustrato y biomasa.

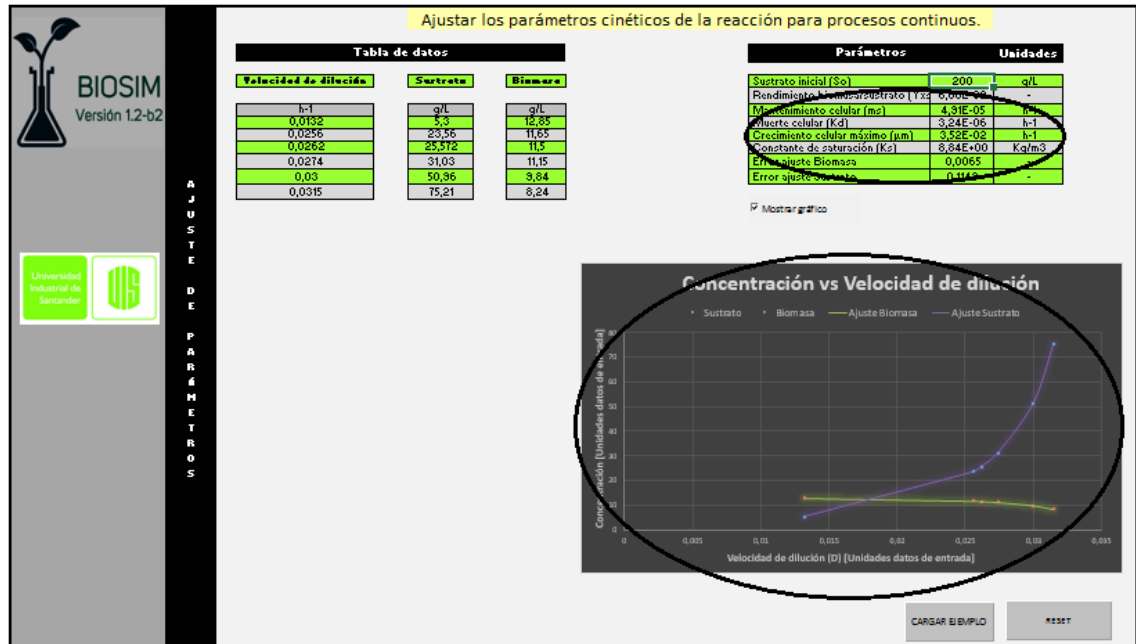
- Se introducen los diferentes datos de D, S y X a la “Tabla de datos” en la parte izquierda de la hoja (máximo 21 valores), así como el valor del sustrato inicial en la tabla de “Parámetros”, seleccionando sus respectivas unidades de medida de la lista desplegable.

Figura 14. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Tabla de datos para ajuste de parámetros.



- Al introducir todos los datos exigidos por la herramienta, automáticamente se realiza el ajuste, imprimiendo los resultados en la tabla “Parámetros” de la parte derecha de la hoja y en la gráfica que muestra velocidad de dilución Vs. Concentración de sustrato, biomasa y producto.

Figura 15. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, parámetros ajustados y grafica de velocidad de dilución vs Concentración de biomasa y sustrato.



* Es posible mostrar o no el gráfico, seleccionando el recuadro “Mostrar gráfica”. El gráfico es muy útil para verificar el grado de coincidencia entre el modelo de Monod y los datos experimentales suministrados por el usuario. Los puntos representan el valor máximo y mínimo de la productividad de biomasa y producto y las líneas continuas representan la productividad de biomasa y producto.

* El botón “RESET” limpia las casillas y las deja vacías.

* El botón “CARGAR EJEMPLO”, muestra un ejercicio ya resuelto como prueba.

2.3. Simulación y diseño

En la hoja de “Simulación y diseño”, la herramienta se encarga de calcular la cantidad de biomasa, sustrato y producto que influyen en el bioproceso.

- La tabla con los valores que se encuentra a la izquierda del botón “SIMULAR” son los datos que se requieren para hacer la simulación del proceso. La herramienta exige un mínimo de datos para poder hacer el cálculo (las casillas con el nombre “obligatorio”) si no se conocen es necesario suponerlos (con estimaciones válidas). Igualmente, junto al valor se selecciona de la lista desplegable las unidades de medida de las variables.

Figura 16. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, datos de alimentación para simulación y diseño de biorreactores en continuo.

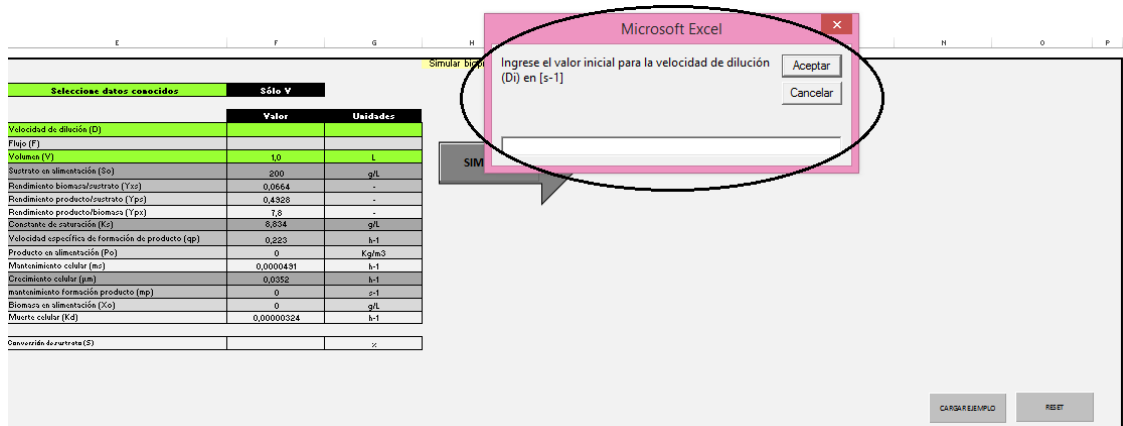
The screenshot shows the BIOSIM software interface. On the left, a table lists input parameters with columns for 'Valor' (Value) and 'Unidades' (Units). A 'SIMULAR' button is positioned between the input and output tables. On the right, a table displays the calculated output parameters.

Selección de datos conocidos		
	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	Obligatorio	h ⁻¹
Flujo (F)	Obligatorio	m ³ /d
Volumen (V)	Obligatorio	m ³
Sustrato en alimentación (S ₀)	Obligatorio	g/L
Requerimiento biomasa/sustrato (Y _{xs})	Obligatorio	-
Requerimiento producto/sustrato (Y _{ps})	Obligatorio	-
Requerimiento producto/biomasa (Y _{px})	Obligatorio	-
Constante de saturación (K _s)	Obligatorio	g/L
Velocidad específica de formación de producto (q _p)	Obligatorio	h ⁻¹
Producto en alimentación (P ₀)	Obligatorio	kg/m ³
Mantenimiento celular (m _s)	Obligatorio	h ⁻¹
Requerimiento celular (μ _m)	Obligatorio	h ⁻¹
Mantenimiento formación producto (m _p)	Obligatorio	s ⁻¹
Densidad en alimentación (ρ ₀)	Obligatorio	g/L
Muerte celular (k _d)	Obligatorio	h ⁻¹
Conversión de sustrato a biomasa	Obligatorio	%

	Valor	Unidades	
Biomasa	Velocidad de crecimiento (μ)	0,00E+00	g/h ³ s
Sustrato	Biomasa (X)	0,00	kg/m ³
	Velocidad de consumo de sustrato (r _s)	0,00E+00	kg/m ³ s
Producto	Sustrato (S)	0,00	kg/m ³
	Velocidad de formación de producto (r _p)	0,00E+00	kg/Ls
Productividad	Producto (P)	0,00	kg/m ³
	Productividad de Biomasa (Q _x)	0,0000	g/L/h
Subproductos	Productividad de Producto (Q _p)	0,0000	g/L/h
	CO ₂	0,0000	kg/m ³
	H ₂ O*	0,0000	kg/m ³
*Valores calculados a partir de estequiometría conocida			
Energía	CALOR DE REACCIÓN*	0,0	kJ/kmol de S
Dimensionamiento	Altura (H)	0,00	m
	Diámetro (D)	0,00	cm
	Valor relación (HD)	Obligatorio	

- En bioprocesos continuos, el flujo (F), la velocidad de dilución (D) y el volumen del biorreactor (V) son las variables relevantes. Para realizar la simulación es necesario conocer al menos uno o dos de ellos y la herramienta se encarga de calcular los demás.
- Se debe escoger en la casilla “Seleccione datos conocidos”, las variables cuyo valor es conocido en el ejercicio.
- Si se conocen flujo (F) y volumen (V), flujo (F) y velocidad de dilución (D) o volumen (V) y velocidad de dilución (D), la herramienta calcula el tercer dato por la relación entre las tres variables.
- Si se conoce solo flujo (F) o solo volumen (V), al dar clic en el botón “SIMULAR”, BIOSIM le solicitará colocar un valor inicial y uno final para la velocidad de dilución que debe ser menor a μ_m , así como un valor del paso para variar la velocidad de dilución (D) (ingresar el valor y aceptar).

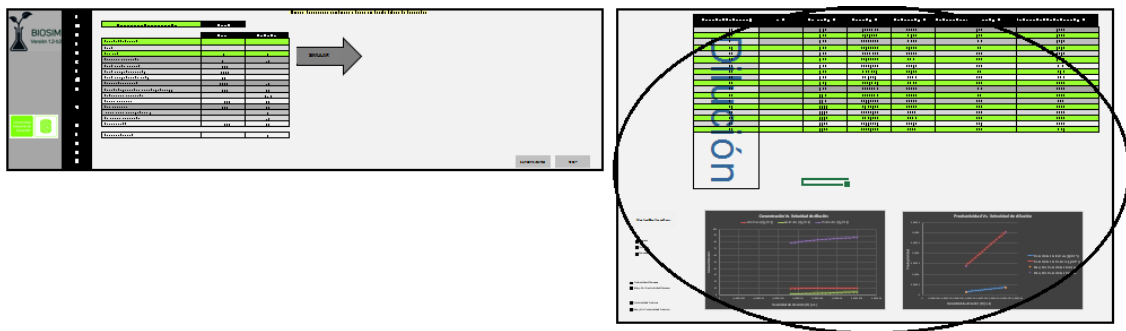
Figura 17. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, variación de la velocidad de dilución para la simulación de bioprocesos.



La herramienta realizará una variación entre los valores de D (máximo 30), a su vez va graficando (gráfica 1: Concentración de biomasa, sustrato y producto vs velocidad de dilución, gráfica 2: productividad de biomasa y de producto vs velocidad de dilución) para encontrar el dato óptimo de la velocidad de dilución (se toma el que el usuario decida a conveniencia).

La herramienta también permite decidir si se muestra o no la gráfica con los datos, haciendo clic en el botón “mostrar/ocultar gráficos”.

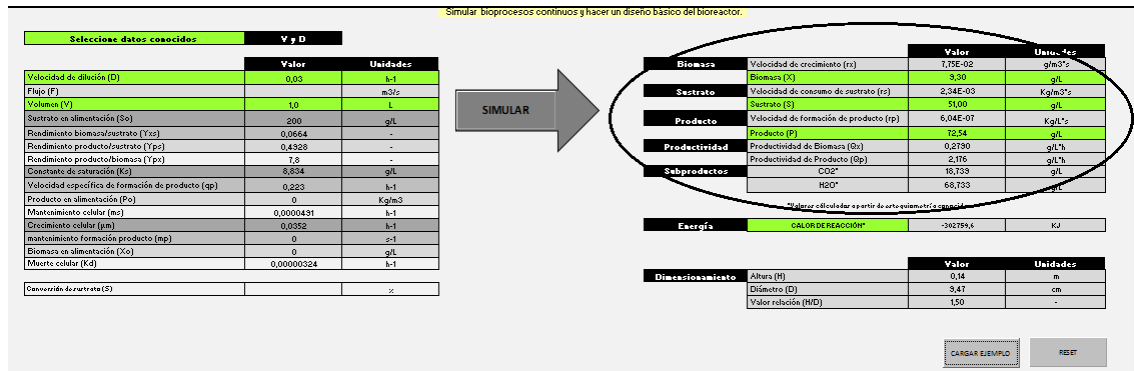
Figura 18. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, tabla de variaciones de velocidad de dilución y gráficas de productividad de biomasa y producto y concentración de biomasa, sustrato y producto vs velocidad de dilución.



- Si se conoce solo D, no es posible calcular el valor de F ni de V, así como tampoco es posible realizar un diseño básico del biorreactor (“Dimensionamiento”).
1. Después de tener completo los pasos 1 y 2, se hace clic en el botón “SIMULAR” para que la herramienta realice la simulación del bioproceso y muestre los

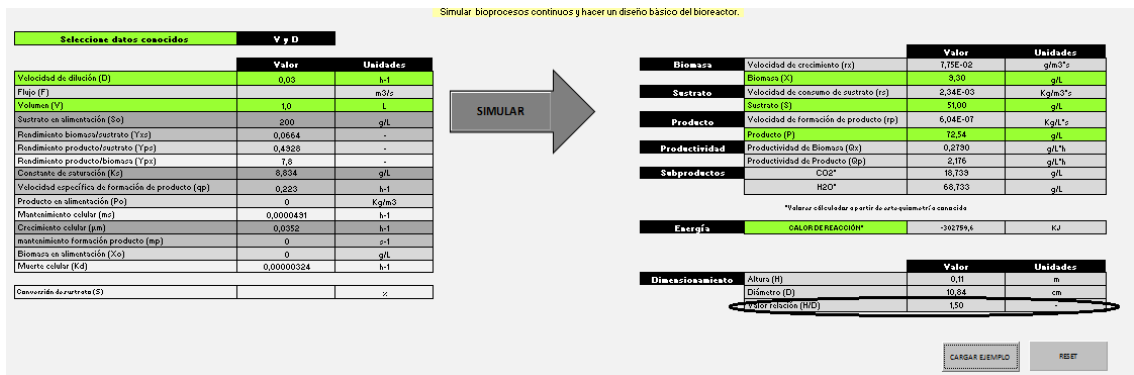
resultados de biomasa producida, sustrato consumido y producto producido y los datos de productividad.

Figura 19. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, datos obtenidos de la simulación del bioproceso.



- Para el diseño básico del biorreactor, en la sección de “Dimensionamiento” es necesario ingresar el dato en la casilla “valor relación H/D” y hacer clic en el botón “SIMULAR” para que la herramienta calcule la altura y el diámetro del equipo.

Figura 20. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, dimensionamiento del biorreactor.



- * Los resultados de CO₂* y H₂O* dependen de la estequiometría del proceso.
- * El botón “RESET” limpia las casillas y las deja vacías.
- * El botón “CARGAR EJEMPLO”, muestra un ejercicio ya resuelto como prueba.

3. Simulación en Aspen Hysys

- Para empezar, en la hoja “HYSYS” es necesario modificar la casilla “Directorio” que se refiere a la ubicación de la carpeta “Cases” de Aspen HYSYS. Es importante situar el lugar en el que se encuentra instalado el programa en el ordenador y la versión del mismo para poder escribir la dirección correcta.

*Ejemplo: Si el programa Aspen HYSYS se encuentra guardado en el disco (C:), Archivos de programa (x86), en la carpeta Aspen Tech – Aspen HYSYS V8.0. Entonces el directorio se nombra de la siguiente manera:

C:\Archivos de programa (x86)\AspenTech\Aspen HYSYS V8.0\Cases

*El nombre de la carpeta Cases siempre debe ir al final del texto.

Figura 21. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, simulación HYSYS – directorio.

The screenshot shows the BIOSIM software interface. On the left, there is a logo for BIOSIM Versión 1.2-b2 and the text 'SIMULACIÓN - HYSYS'. Below the logo is the logo of Universidad Industrial de Santander. The main window displays a 'Directorio' field with the path 'C:\Program Files (x86)\AspenTech\Aspen HYSYS V8.0\Cases'. Below this is a table of parameters:

	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	Obligatorio	h-1
Rendimiento biomasa/sustrato (Yxs)	Obligatorio	-
Rendimiento producto/sustrato (Yps)	Obligatorio	-
Rendimiento producto/biomasa (Ypx)	Obligatorio	-
Constante de saturación (Ks)	Obligatorio	g/L
Velocidad específica de formación de producto (qp)	Obligatorio	h-1
Mantenimiento celular (ms)	Obligatorio	h-1
Crecimiento celular (µm)	Obligatorio	h-1
mantenimiento formación producto (mp)	Obligatorio	s-1
Muerte celular (Kd)	Obligatorio	h-1
(Δh°f) Biomasa	Obligatorio	kJ/kgmol
Conversión de sustrato (S)	Opcional	%

Below the table, there are three input fields for 'Nombre Producto', 'Nombre Base Nitrogenada', and 'Nombre Sustrato', each with a dropdown menu set to 'Obligatorio'. To the right of these fields are buttons for 'CARGAR EJEMPLO', 'ENVIAR A HYSYS', and 'RESET'.

- Una vez modificado el directorio, en la hoja “ESTEQUIOMETRÍA” se realiza el balance de masa y el cálculo del calor de la reacción, tal como se explicó en el punto 3.1. Esto con el fin de obtener los coeficientes estequiométricos para conocer qué cantidad de cada componente se alimenta o reacciona en el proceso, para la simulación.
- Sin embargo, para realizar la simulación en Aspen HYSYS, además de los coeficientes estequiométricos, es indispensable conocer los parámetros cinéticos del bioproceso, por tanto, se deben llenar las casillas “obligatorio” con los datos suministrados y sus respectivas unidades que se seleccionan de la lista desplegable. La casilla “Conversión de sustrato (%)” es un dato opcional.

Figura 22. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, simulación HYSYS – Parámetros cinéticos.

Parámetro	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	Obligatorio	h-1
Rendimiento biomasa/sustrato (Yxs)	Obligatorio	g/g
Rendimiento producto/sustrato (Yps)	Obligatorio	g/g
Rendimiento producto/biomasa (Ypx)	Obligatorio	-
Constante de saturación (Ks)	Obligatorio	g/L
Velocidad específica de formación de producto (qp)	Obligatorio	h-1
Mantenimiento celular (ms)	Obligatorio	h-1
Crecimiento celular (µm)	Obligatorio	h-1
mantenimiento formación producto (mp)	Obligatorio	s-1
Muerte celular (Kd)	Obligatorio	h-1
(ΔhT) Biomasa	Obligatorio	kJ/kgmol
Conversión de sustrato (S)	Opcional	%

Nombre Producto: Obligatorio
 Nombre Base Nitrogenada: Obligatorio
 Nombre Sustrato: Obligatorio

Botones: ENVIAR A HYSYS, RESET, CARGAR EJEMPLO

- Paso seguido, se ingresa en las casillas “Nombre Producto”, “Nombre Base Nitrogenada” y “Nombre Sustrato”, la denominación de los compuestos que participan en la reacción tal y como aparecen registrados en la lista de componentes de Aspen HYSYS, de no ser así, el programa no los reconocerá.
- Cuando se hayan ingresado todos los datos requeridos para realizar la simulación, se da clic en el botón “ENVIAR A HYSYS”.
 - * El botón “RESET” limpia las casillas y las deja vacías.
 - * El botón “CARGAR EJEMPLO”, muestra un ejercicio ya resuelto como prueba.

Figura 23. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, simulación HYSYS – Nombre de los compuestos.

Parámetro	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	Obligatorio	h-1
Volumen (V)	Obligatorio	m3
Rendimiento biomasa/sustrato (Yxs)	Obligatorio	-
Rendimiento producto/sustrato (Yps)	Obligatorio	-
Rendimiento producto/biomasa (Ypx)	Obligatorio	-
Constante de saturación (Ks)	Obligatorio	g/L
Velocidad específica de formación de producto (qp)	Obligatorio	h-1
Mantenimiento celular (ms)	Obligatorio	h-1
Crecimiento celular (µm)	Obligatorio	h-1
mantenimiento formación producto (mp)	Obligatorio	s-1
Muerte celular (Kd)	Obligatorio	h-1
(ΔhT) Biomasa	Obligatorio	kJ/kgmol
Conversión de sustrato (S)	Opcional	%

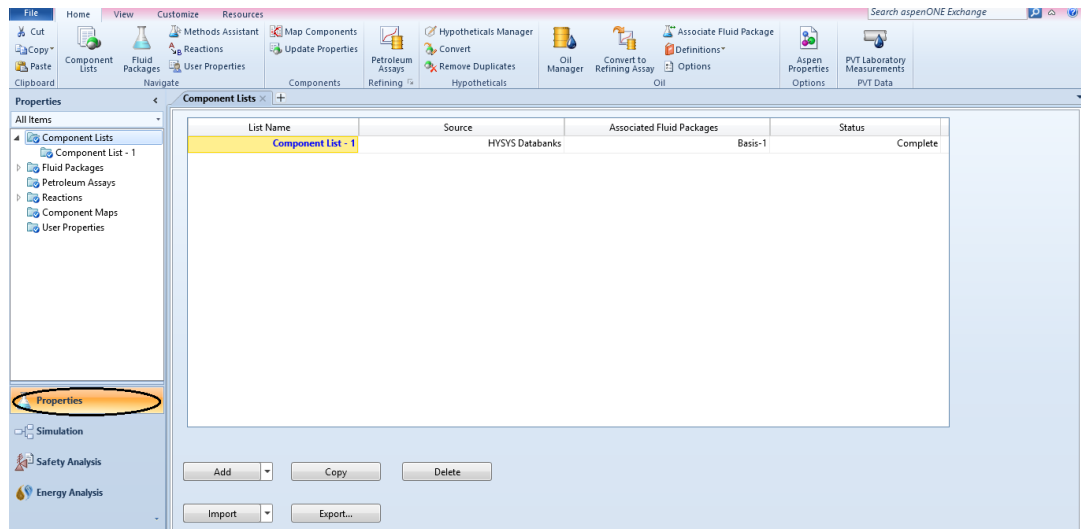
Nombre Producto: Obligatorio
 Nombre Base Nitrogenada: Obligatorio
 Nombre Sustrato: Obligatorio

Botones: ENVIAR A HYSYS, RESET

Ingresar el nombre de los compuestos exactamente como son nombrados en Aspen Hysys. Ejemplo: Etanol.

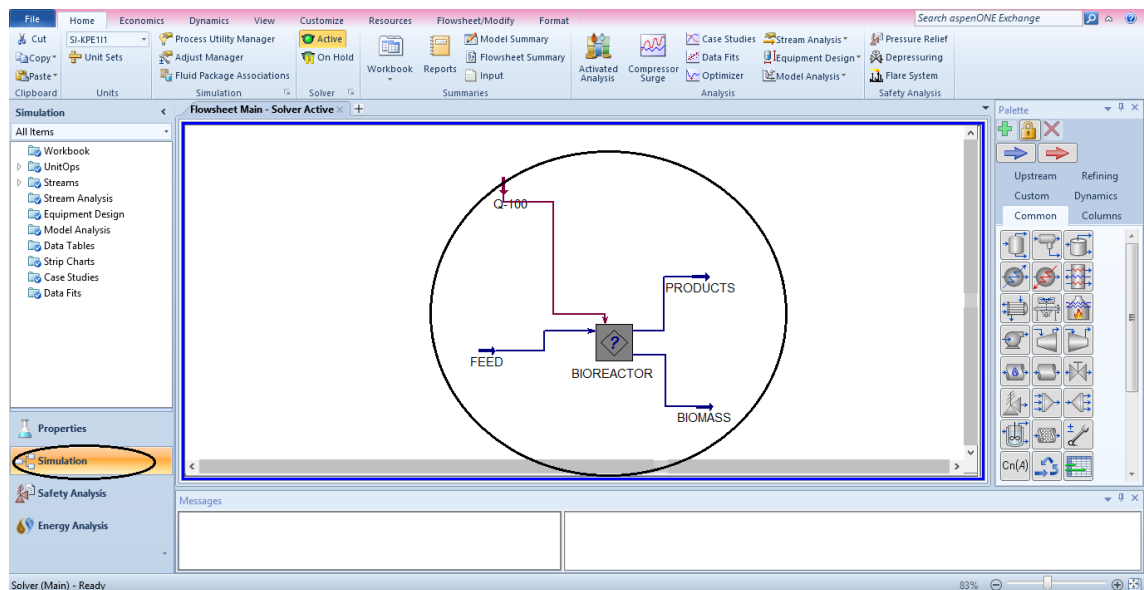
* Antes de enviar los datos a Hysys, es necesario ubicarse en la sección “Properties” en Aspen HYSYS, para que el programa pueda recibir los datos suministrados en la hoja de Excel.

Figura 24. Interfaz de Aspen HYSYS, Properties.



- Después de “ENVIAR A HYSYS”, dar clic en la sección “Simulation” para ver la simulación del bioproceso.

Figura 25. Interfaz de Aspen HYSYS, Simulation. Simulación realizada por BIOSIM.



* En HYSYS deben estar ingresados todos los componentes de la reacción, incluso si la reacción es anaerobia, el oxígeno debe ingresarse así sea como cero.

- Al dar doble clic sobre la corriente “FEED”, se puede ver los datos de alimentación al proceso, es posible modificar solo los valores en “azul”, de la sección Worksheet (Condition y composition).

*Para Aspen HYSYS se debe considerar siempre alimentación estéril ($X_o = 0$) para poder realizar la simulación.

*Siempre que se modifique alguno de los datos de la corriente de alimentación, el modo de depuración (Debug) se activa; por lo tanto es necesario dar clic en “Run” y “OK” cada vez que lo pida el programa (tres veces cada uno).

Figura 26. Interfaz de Aspen HYSYS, Simulation. Material Stream: FEED-Conditions.

Worksheet	Stream Name	FEED	Vapour Phase	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0641	0,0641	0,9359
Properties	Temperature [C]	25,00	25,00	25,00
Composition	Pressure [bar_g]	-3,250e-003	-3,250e-003	-3,250e-003
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	1,187	7,613e-002	1,111
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	183,2	1,296	181,9
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0,1576	2,104e-003	0,1555
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-7,893e+004	-4,571e+004	-8,121e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-54,38	209,0	-72,43
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-9,369e+004	-3480	-9,021e+004
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	6,840e-002	2,117e-003	6,344e-002
	Fluid Package	Basis-1		
	Utility Type			

Al dar doble clic en la corriente “PRODUCTS” en Worksheet, se pueden ver los resultados obtenidos de la simulación para esta corriente de salida. Igualmente para la corriente “BIOMASS”. Igualmente para la corriente de calor Q-100.

Figura 27. Interfaz de Aspen HYSYS, Simulation. Material Stream: PRODUCTS – Composition.

	Mass Flows	Vapour Phase	Liquid Phase
H2O	4.8237	0.2180	4.6057
CO2	55.2045	55.1731	0.0315
Ammonia	1.1752	1.0248	0.1504
Dextrose	51.0027	0.0000	51.0027
Biomasa*	0.0000	0.0000	0.0000
Ethanol	62.8680	3.6251	59.2429
Oxygen	0.0000	0.0000	0.0000

Total 175,07414 kg/h

La gran ventaja de esta herramienta de cálculo, es que permite combinar los bioprocesos (biorreactores) con diferentes operaciones unitarias, lo que hace posible realizar la simulación de todos los equipos requeridos en una planta para determinado proceso.

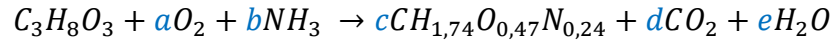
4. LIMITACIONES DE LA HERRAMIENTA

- **Relaciones másicas no permitidas:** Si se tienen procesos con relaciones másicas de los compuestos, no es posible calcular la estequiometría de la reacción; la herramienta hace el cálculo de los coeficientes estequiométricos a partir de datos en unidades molares.
- **Unidades de medida limitadas:** La herramienta tiene una lista de unidades de medida del Sistema Internacional y solo una unidad del Sistema inglés. Es posible que no se encuentren todas las unidades que se deseen.
- **Cálculo para una sola reacción:** Algunos bioprocesos cuentan con más de una reacción química para llevarse a cabo; esta herramienta de cálculo solo permite trabajar con una sola reacción.

5. EJERCICIOS DE APLICACIÓN

- **Producción de biomasa celular a partir de glicerol.**

Se produce biomasa celular (bacteria) a partir de glicerol en un cultivo aerobio, utilizando amoníaco como fuente de nitrógeno. La reacción química se describe de la siguiente forma:



Con un coeficiente de respiración:

$$RQ = 0,42 = d/a$$

Determinar la estequiometría y el calor de la reacción.

Solución

Figura 28. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para crecimiento microbiano – Producción de biomasa celular a partir de Glicerol.

The screenshot shows the BIOSIM software interface. The main window displays the chemical reaction: $1 \text{ Sustrato} + a O_2 + b \text{ Base nitrogenada} \rightarrow c \text{ Biomasa} + d CO_2 + e H_2O + f \text{ Producto extracelular}$. The reaction is set to be aerobic and microbial growth. The molecular formula table is as follows:

Componente	C	H	O	N
Sustrato (S)	3	8	3	0
Oxígeno	0	0	2	0
Base nitrogenada	0	3	0	1
Biomasa (X)	1	1,74	0,47	0,24
CO ₂	1	0	2	0
H ₂ O	0	2	1	0
Producto extracelular (P)	0	0	0	0

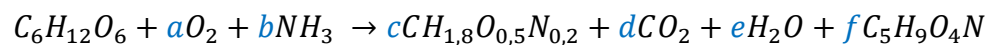
The reaction coefficient table shows the following values:

Coeficiente estequiométrico	Valor
a	0,77
b	0,64
c	2,68
d	0,32
e	2,63
f	0,00
Error	1,8E-14

The 'CALOR DE RECCIÓN [kJ/kmol de S]' is calculated as -354093,8. The interface also includes a 'CALCULAR' button and a 'RESET' button.

- **Producción de ácido glutámico.**

Las células inmovilizadas de una cepa genéticamente mejorada de *Brevibacterium lactofermentum* se utilizan para convertir la glucosa en ácido glutámico para la producción de MSG (glutamato monosódico). Las células inmovilizadas son incapaces de crecer, pero metabolizan la glucosa de acuerdo con la ecuación:



Se toma la fórmula molecular de la literatura para la biomasa.

Determinar el calor de la reacción, si el rendimiento $Y_{p/s} = 0,067$.

Solución

Figura 29. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para crecimiento microbiano – Producción de Ácido Glutámico.

The screenshot shows the BIOSIM software interface. At the top, the title is "Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química." The reaction is defined as: $1 \text{ Sustrato} + a \text{ O}_2 + b \text{ Base nitrogenada} \rightarrow c \text{ Biomasa} + d \text{ CO}_2 + e \text{ H}_2\text{O} + f \text{ Producto extracelular}$. The organism is set to "Bacteria".

The "Fórmula molecular" table is as follows:

Componente	C	H	O	N
Sustrato (S)	6	12	6	0
Oxígeno	0	0	2	0
Base nitrogenada	0	3	0	1
Biomasa (M)	1	3,8	0,5	0,2
CO ₂	1	0	2	0
H ₂ O	0	2	1	0
Producto extracelular (P)	5	9	4	1

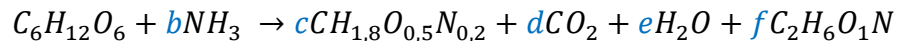
The "Balance de la reacción" table shows the following coefficients:

Coefficiente estequiométrico	Value
a	1,93
b	0,78
c	3,98
d	2,08
e	3,65
f	0,07
Error	3,7E-12

The "CALOR DE RECCIÓN (kJ/kmol de S)" is calculated as -889278,2. The yield $Y_{p/s}$ is 0,067.

- **Fermentación etanólica continua anaeróbica.**

Se estudia la fermentación continua en un fermentador tipo tanque agitado de 1L de capacidad utilizando una cepa de *Saccharomyces Cerevisiae* altamente resistente al etanol. Se opera a 30°C durante todo el proceso en estricta anaerobiosis con disoluciones glucosadas de 200 g/L. (Se sigue el modelo de Monod).



- Velocidad de dilución = $0,030 \text{ (h}^{-1}\text{)}$ (en este valor de D se representa la mayor productividad de producto), Volumen = 1 L. Crecimiento celular ($\mu_{m\acute{a}x}$) = $0,0352 \text{ (h}^{-1}\text{)}$. Constante de saturación (K_s) = 8,834 g/L. Calor de formación de la biomasa = 1700000 KJ/Kmol. El mantenimiento celular (m_s) es prácticamente nulo, lo que indica que apenas se utiliza sustrato para el mantenimiento celular una vez alcanzado el estado estacionario.
- Rendimiento producto/sustrato ($Y_{p/s}$) = 0,4928.
- Rendimiento biomasa/sustrato ($Y_{x/s}$) = 0,067.
- Rendimiento producto/biomasa (Y/x) = 7,8.
- La relación altura/diámetro del biorreactor es de 1,5.

Los valores experimentales de Biomasa (X), Producto (P) y Sustrato (S) para diferentes velocidades de dilución (D), se encuentran expuestas en la siguiente tabla:

Tabla 1. Datos experimentales de Biomasa, producto y sustrato para diferentes velocidades de dilución en la producción de etanol.

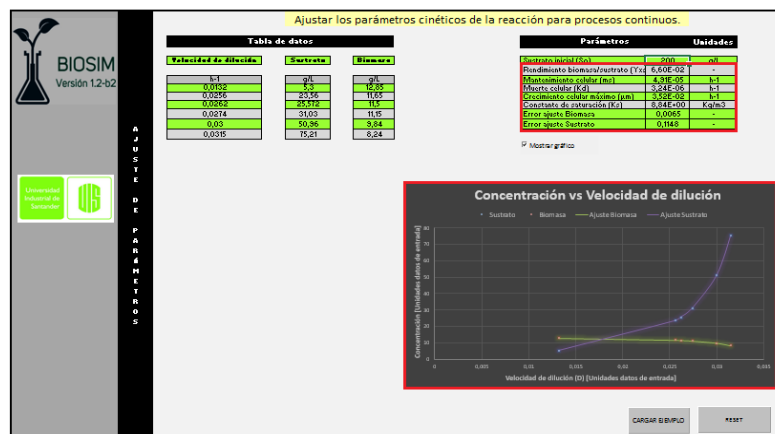
Fuente: Fermentación etanólica continua anaeróbica con *Saccharomyces Cerevisiae* resistente al alcohol. <http://www.ugr.es/~fcamacho/Originales/Trabajos%20Publicados/AQ1993.pdf>. [Fecha de publicación: 20 de julio de 1993]

D (h^{-1})	S (g/L)	X (g/L)	P (g/L)
0,0132	5,30	12,85	88,84
0,0256	23,56	11,65	84,78
0,0262	25,72	11,50	83,85
0,0274	31,03	11,15	81,48
0,0300	50,96	9,84	72,17
0,0315	75,21	8,24	60,57

Solución

- Para ajuste de parámetros:

Figura 30. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para ajuste de parámetros – Fermentación etanólica continua anaeróbica.



- Para simulación y diseño:

Figura 31. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para simulación y diseño – Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Simular bioprocesos continuos y hacer un diseño básico del bioreactor.

Selección de datos conocidos			V I D			
	Valor	Unidades		Valor	Unidades	
Velocidad de dilución (D)	0,03	h ⁻¹	Biomasa	Velocidad de crecimiento (μ)	7,75E-02	g/m ³ ·s
Flujo (F)	10	m ³ /h	Biomasa (X)	Biomasa (X)	9,30	g/m ³
Volumen (V)	1	L	Sustrato	Velocidad de consumo de sustrato (r _s)	2,94E-03	kg/m ³ ·s
Sustrato en alimentación (S ₀)	200	g/L	Producto	Velocidad de formación de producto (r _p)	6,04E-07	kg/L·s
Rendimiento biomasa/sustrato (Y _{xs})	0,0664	-	Producto (P)	Producto (P)	72,64	g/m ³
Rendimiento producto/sustrato (Y _{ps})	0,4928	-	Productividad	Productividad de Biomasa (Q _x)	0,2750	g/L·h
Rendimiento producto/biomasa (Y _{px})	7,8	-	Productividad	Productividad de Producto (Q _p)	2,98	g/L·h
Constante de saturación (K _s)	8,834	g/L	Subproductos	CO ₂	0,000	kg/m ³
Velocidad específica de formación de producto (q _p)	0,223	h ⁻¹		H ₂ O ²	0,000	kg/m ³
Producto en alimentación (P ₀)	0	kg/m ³	*Valores calculados a partir de estequiometría conocida			
Mantenimiento celular (m _s)	0,000491	h ⁻¹	Energía	CALOR DE REACCIÓN	0,0	kJ/mol de S
Crecimiento celular (μ _m)	0,0352	h ⁻¹	Dimensionamiento	Altura (H)	0,34	m
Mantenimiento formación producto (m _p)	0	h ⁻¹		Diámetro (D)	2,47	cm
Biomasa en alimentación (X ₀)	0	g/L		Valor relación (H/D)	1,50	-
Muerte celular (K _d)	0,0000324	h ⁻¹				
Conversión de sustrato (S)	74,50	%				

SIMULAR

- Para HYSYS:

Figura 32. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para simulación en HYSYS – Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Calcular coeficientes estequiométricos y calor de la reacción química.

Reacción Química: 1 Sustrato + a O₂ + b Base nitrogenada → c Biomasa + d CO₂ + e H₂O + f Producto extracelular

Forma: Anaerobia Crecimiento microbiano Formación de producto

Fórmula molecular	C	H	O	N	Calor de combustión (ΔH° _c) [kJ/kmol]
Sustrato (S)	6	12	6	0	-2,81E+06
Base nitrogenada	0	3	0	1	-382600
Biomasa (X)	1	1,8	0,5	0,2	-570720
CO ₂	1	0	2	0	0
H ₂ O	0	2	1	0	0
Producto extracelular (P)	2	6	1	0	-1,24E+06

Balance de la reacción	
Coeficiente estequiométrico	
b	0,17
c	0,83
d	1,75
e	0,37
f	1,71
Error	4,2E-17

CALOR DE REACCIÓN [kJ/mol de S] = -283521,4

CALCULAR

Figura 32. Interfaz de la herramienta de cálculo BIOSIM, Solución del ejercicio para simulación en HYSYS – Fermentación etanólica continua anaeróbica.

Directorio: C:\Program Files\Hypertech\HYSYS 3.2\Cases

	Valor	Unidades
Velocidad de dilución (D)	0,03	h ⁻¹
Volumen (V)	33,33	m ³
Rendimiento biomasa/sustrato (Y _{xs})	0,0664	-
Rendimiento producto/sustrato (Y _{ps})	0,4928	-
Rendimiento producto/biomasa (Y _{px})	7,8	-
Constante de saturación (K _s)	8,834	g/L
Velocidad específica de formación de producto (q _p)	0,223	h ⁻¹
Mantenimiento celular (m _s)	0,000491	h ⁻¹
Crecimiento celular (μ _m)	0,0352	h ⁻¹
Mantenimiento formación producto (m _p)	0	h ⁻¹
Muerte celular (K _d)	0,0000324	h ⁻¹
(ΔH°) Biomasa	1,70E+06	kJ/gmol
Conversión de sustrato (S)		%

Nombre Producto: Ethanol

Nombre Base Nitrogenada: Ammonia

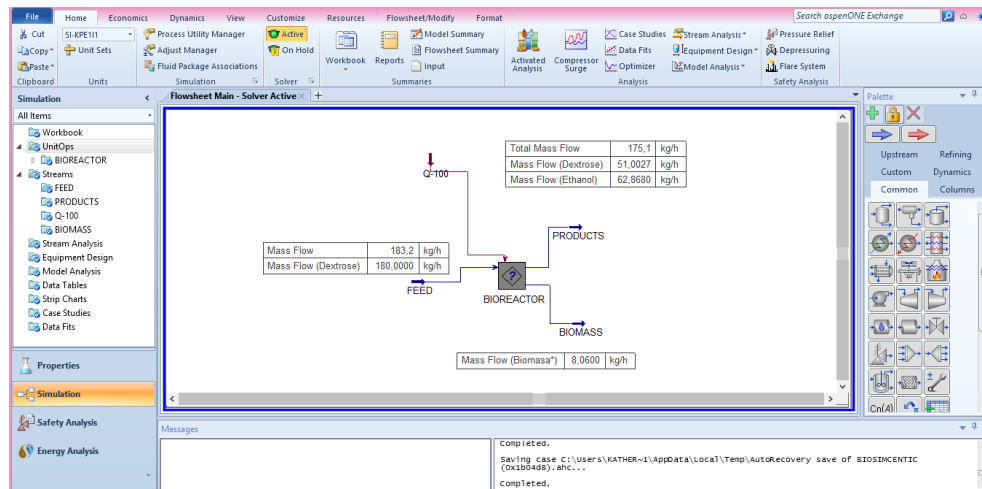
Nombre Sustrato: Dextrose

ENVIAR A HYSYS

CARGAR EJEMPLI

RESET

Figura 34. Interfaz de Aspen Hysys, Solución del ejercicio para simulación en HYSYS – Fermentación etanólica continua anaeróbica.



6. INFORMACIÓN DE CONTACTO

Cualquier inquietud con respecto a la herramienta de cálculo “BIOSIM”, comunicarse con:

Fausto Enrique Rueda Correa fenrique93@hotmail.com

Katherine del Rosario Ríos López katherios16@hotmail.com

Iván Darío Ordóñez Sepúlveda ivan.ordonez@correo.uis.edu.co

Viviana Sánchez Torres viviana.sanchez@correo.uis.edu.co