

Intensificación del proceso de producción de etanol lignocelulósico

Presenta:

Mtro. Moisés Alberto González Contreras

Doctorado en Ciencias Naturales e Ingeniería

Universidad Autónoma Metropolitana – Cuajimalpa

Directora:

Dra. María Teresa López Arenas

Departamento de Procesos y Tecnología

División de Ciencias Naturales e Ingeniería

Universidad Autónoma Metropolitana – Cuajimalpa

Asesores:

Dr. Arturo Sánchez Carmona

Laboratorio de Futuros en Bioenergía

CINVESTAV - Unidad Guadalajara

Dra. Helen Denise Lugo Méndez

Departamento de Procesos y Tecnología

División de Ciencias Naturales e Ingeniería

Universidad Autónoma Metropolitana – Cuajimalpa

DECLARACIÓN DE CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de México, D. F. el día 13 de enero de 2021, el que suscribe Moisés Alberto González Contreras, alumno del Programa de Doctorado en Ciencias Naturales e Ingeniería de la División de Ciencias Naturales e Ingeniería de la Universidad Autónoma Metropolitana-Unidad Cuajimalpa, manifiesta que es autor intelectual de la presente tesis doctoral intitulada: “Intensificación del proceso de producción de etanol lignocelulósico” realizada bajo la dirección de la Dra. María Teresa López Arenas y la asesoría del Dr. Arturo Sánchez Carmona y la Dra. Helen Denise Lugo Méndez y cede los derechos de este trabajo a la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) para su difusión con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráfico o de datos del trabajo, sin el permiso expreso de la directora del trabajo como representante de la UAM. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección: mtlopez@correo.cua.uam.mx

Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.



Moisés Alberto González Contreras

DECLARACIÓN DE ORIGINALIDAD

“El que suscribe, Moisés Alberto González Contreras, alumno del Programa de Doctorado en Ciencias Naturales e Ingeniería declara que los resultados reportados en esta tesis doctoral son producto de mi trabajo con el apoyo permitido de terceros en cuanto a su concepción y análisis. Así mismo, declaro que hasta donde es de mi conocimiento no contiene material previamente publicado o escrito por otras personas excepto donde se reconoce como tal a través de citas y que este fue usado con propósitos exclusivos de ilustración o comparación. En este sentido, afirmo que cualquier información sin citar a un tercero es de mi propia autoría. Declaro, finalmente, que la redacción de este trabajo es producto de mi propia labor con la dirección y apoyo de mi director y de mi comité tutorial, en cuanto a la concepción del proyecto, al estilo de la presentación y a la expresión escrita.”



Moisés Alberto González Contreras

DECLARACIÓN DE NO LUCRO

El que suscribe, Moisés Alberto González Contreras, alumno del Programa de Doctorado en Ciencias Naturales e Ingeniería, manifiesta su compromiso de no utilizar con fines de difusión, publicación, protección legal por cualquier medio, licenciamiento, venta, cesión de derechos parcial o total o de proporcionar ventajas comerciales o lucrativas a terceros, con respecto a los materiales, datos analíticos o información de toda índole, relacionada con las actividades e intercambios de información derivados de la relación de investigación académica y tecnológica desarrollada entre la Universidad Autónoma Metropolitana (UAM) y Moisés Alberto González Contreras.



Moisés Alberto González Contreras

A Dios, el verdadero autor de nuestras obras.

A mis padres Víctor y María Elena, por ser mi fuente de inspiración, sabiduría y amor.

A mis hermanas Verónica y Linda, que siempre me han apoyado.

A la memoria de mi hermano Victo Hugo, que siempre creyó en mí.

A mis sobrinos.

AGRADECIMIENTOS

Me gustaría que estas líneas sirvieran para expresar mi más profundo y sincero agradecimiento a todas aquellas personas que con su ayuda han colaborado en la realización del presente trabajo.

Quiero agradecer de manera especial a la Dra. María Teresa López Arenas, directora de esta investigación, por la orientación, el seguimiento y la supervisión continua de la misma, pero sobre todo por brindarme esta oportunidad y confiar en mí.

También un agradecimiento al Dr. Alfonso Mauricio Sales Cruz, a la Dra. Helen Denise Lugo Méndez, y al Dr. Arturo Sánchez Carmona, por brindarme su tiempo y sus valiosos conocimientos.

Agradezco el apoyo recibo al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (Conacyt) por la beca otorgada para estudios de doctorado (CVU: 573123), al Fondo de Sostenibilidad Energética 2014-05 (Conacyt-Sener), y al Centro Mexicano de Innovación en Bioenergía, Clúster de Bioalcoholes [subvención número 249564].

RESUMEN

Las biorrefinerías de segunda generación (2G) han mostrado gran potencial para convertir desechos lignocelulósicos en combustibles, energía y otros productos de valor agregado. Sin embargo, a pesar de los esfuerzos realizados en investigación y desarrollo (I&D), existen diversas barreras por superar y lograr una exitosa operación y rentabilidad. Esto motiva a intensificar las biorrefinerías 2G integrando las operaciones unitarias, realizando integración másica y análisis de integración de calor. El principal enfoque de este trabajo es presentar los aspectos más importantes del diseño y síntesis para la intensificación de biorrefinerías 2G, así como proponer un enfoque factorial para evaluar diferentes configuraciones de procesos mediante la definición de un criterio de intensificación global. Este criterio incorpora indicadores para evaluar las emisiones de residuos, el consumo de servicios auxiliares, el consumo de energía eléctrica y el costo de producción. La metodología propuesta se utiliza para decidir la mejor estructura de síntesis y diseño de una biorrefinería 2G intensificada para la producción de etanol lignocelulósico anhidro como producto principal. Se proponen varias configuraciones de biorrefinería considerando diferentes niveles de intensificación y comparando dos pretratamientos y dos procesos de separación alternativos. Como resultado, el diseño mejor intensificado se identifica utilizando el criterio de intensificación global propuesto. Hasta ahora no existe en la literatura, basada en los conceptos de la ingeniería de sistemas de proceso (*Process System Engineering*, PSE), un análisis que englobe los principales criterios de la intensificación para la toma de decisiones sobre el diseño y síntesis de un proceso, por lo que los resultados de este trabajo son de gran relevancia en la I&D de la ingeniería de procesos asistida por computadora.

TABLA DE CONTENIDO

1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	Marco teórico	4
1.1.1	Ingeniería de sistemas de proceso e intensificación de procesos	4
1.1.2	Diseño y síntesis.....	5
1.1.3	Materias primas lignocelulósicas	6
1.1.4	Pretratamiento	6
1.1.5	Sacarificación y fermentación.....	7
1.1.6	Separación y purificación.....	9
1.2	Objetivos.....	11
1.3	Organización de la tesis.....	11
2	METODOLOGÍA	12
2.1	Diseño conceptual de la biorrefinería	12
2.1.1	Integración de operaciones unitarias	13
2.1.2	Análisis de integración de calor	16
2.1.3	Integración de masa.....	16
2.2	Evaluación de los objetivos de intensificación.....	17
2.2.1	Evaluación económica	17
2.2.2	Evaluación de energía	19
2.2.3	Evaluación de residuos y emisiones.....	20
2.2.4	Criterio global de intensificación	21

3	CASO DE ESTUDIO: BIORREFINERÍA 2G PARA LA PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO	24
3.1	Proceso de condicionamiento.....	27
3.2	Proceso de pretratamiento.....	28
3.2.1	Pretratamiento con ácido diluido.....	28
3.2.2	Pretratamiento por explosión de vapor.....	29
3.3	Sacarificación y co-fermentación simultánea (SCFS)	30
3.4	Proceso de separación y purificación.....	32
3.4.1	Adsorción con tamices moleculares	33
3.4.2	Destilación extractiva.....	34
3.5	Proceso de cogeneración de electricidad.....	35
3.6	Tratamiento de aguas residuales.....	36
4	ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	38
4.1	Evaluación de costos.....	40
4.2	Evaluación de energía	41
4.3	Evaluación de residuos y emisiones	44
4.4	Evaluación de los criterios de intensificación de procesos	46
4.5	Biorrefinerías intensificadas	48
5	CONCLUSIONES.....	50
6	REFERENCIAS.....	52

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Flujo metabólico para la producción de etanol en <i>Zymomona mobilis</i> (Adaptada de Yang et al., 2016).	9
Figura 2: Diseño conceptual para una biorrefinería lignocelulósica.	13
Figura 3. Diseño conceptual para el proceso de producción de ethanol 2G.	25
Figura 4. Composición del bagazo de caña de azúcar (Hernández et al., 2019).	25
Figura 5. Diagrama de flujo para el acondicionamiento de la materia prima.	28
Figura 6. Diagrama de flujo para el pretratamiento con ácido diluido (P1).	29
Figura 7. Diagrama de flujo de la etapa de pretratamiento por explosión de vapor.	30
Figura 8. Diagrama de flujo de la etapa de SSCF.	31
Figura 9. Diagrama de flujo del proceso para la separación 1 (S1) mediante adsorción con tamices moleculares.	33
Figura 10. Diagrama de flujo del proceso para la separación 2 (S2) mediante destilación extractiva.	35
Figura 11. Diagrama de flujo de proceso para cogeneración (C)	36
Figura 12. Diagrama de flujo de proceso para el tratamiento de aguas residuales (W).	37
Figura 13. Diagramas de curvas compuestas para el análisis de integración de calor de las configuraciones intensificadas: (a) P1S1-WC, (b) P1S2-WC, (c) P2S1-WC, (d) P2S2-WC.	39
Figura 14. Evaluación del costo unitario de producción (Y_i)	41
Figura 15. Evaluación del rendimiento de consumo de energía (Y_2)	42
Figura 16. Evaluación del consumo de energía, dividido por etapas del proceso.	43
Figura 17. Evaluación del EROI.	44
Figura 18. Evaluación del rendimiento de desechos (Y_3).	46
Figura 19. Evaluación de los criterios de intensificación de proceso (Y_{int}): (a) $w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$, (b) $w_1 = 0.5$, $w_2 = w_3 = 0.25$, (c) $w_1 = 0.75$, $w_2 = w_3 = 0.125$, (d) $w_1 = 1$, $w_2 = w_3 = 0$	48

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Biorrefinerías 2G para la producción a gran escala de bioetanol (Sanford et al., 2016; Rosales-Calderon & Arantes, 2019).	2
Tabla 2. Reacciones y conversiones para la producción de etanol.	31
Tabla 3. Parámetros de diseño para los procesos de separación.	32
Tabla 4. Calidad del agua en el proceso de tratamiento de aguas residuales.	45
Tabla 5. Resumen ejecutivo de los diseños mejor intensificados	49

1 INTRODUCCIÓN

Las biorrefinerías permiten el procesamiento de biomásas para ser transformadas en una amplia variedad de productos, como combustibles y productos químicos orgánicos de valor agregado, por ejemplo: aminoácidos, enzimas, ácidos orgánicos, antibióticos, entre otros. Dependiendo el tipo de materia prima procesada en la biorrefinería, esta puede ser clasificada como: biorrefinería de primera generación (1G), la cual utiliza azúcares, almidón, o cultivos oleaginosos; biorrefinerías de segunda generación (2G), utiliza materiales lignocelulósicos, en su mayoría residuos agroindustriales, los cuales contienen principalmente celulosa, hemicelulosa y lignina; biorrefinerías de tercera generación (3G), utiliza algas con alto contenido de aceite y celulosa (Prado-Rubio et al., 2016). Las biorrefinerías de segunda generación han recibido gran atención en investigación y desarrollo, ya que las materias primas lignocelulósicas no representan una competencia con los alimentos, presentan un equilibrio neutro de CO₂ como recurso renovable y su alta disponibilidad debido a su procedencia como son los desechos agroindustriales, forestales, cultivos energéticos, desechos sólidos municipales, etcétera. En décadas recientes, se han construido plantas de segunda generación a gran escala para la producción de etanol anhidro en varios países Tabla 1, sin embargo, su operación industrial no ha logrado alcanzar el éxito esperado debido principalmente a los altos costos operativos, irregularidades en la cadena de suministro de la biomasa, la complejidad en el manejo de varias materias primas, baja madurez tecnológica, falta de mecanización y estrategias de automatización, así como retos en el escalamiento (Chandel et al., 2018; Rosales-Calderón & Arantes, 2019).

La intensificación de procesos (IP) también ofrece oportunidades importantes para los procesos industriales que merecen su estudio, tales como obtener procesos simplificados, disminución en el consumo de energía, disminución de emisiones, disminución en los costos de operación, aumento de la productividad, mayor capacidad, flexibilidad y seguridad (Lutze et al., 2010). Si bien en la IP hay diversas barreras que se deben superar, como la confiabilidad en tecnología madura, riesgo debido a la falta de precedentes en nuevas tecnologías, elevados costos en equipo nuevo, preocupación sobre seguridad y control, falta de unidades intensificadas y

validadas, y falta de métricas para la evaluación del desempeño (Lutze et al., 2010; Tian & Pistikopoulos, 2019).

Tabla 1. Biorrefinerías 2G para la producción a gran escala de bioetanol (Sanford et al., 2016; Rosales-Calderon & Arantes, 2019).

Compañía	Localización	Materia prima	Pretratamiento	Co-Fermentación	Capacidad instalada (ML/año)	Inicio
BetaRenewables	Crescentino, Italia	Arundo donax (caña gigante)	Proesa™ Explosión de vapor	Levadura recombinante	50.7	2014
GranBio and BetaRenewables	Alagoas, Brasil	Bagazo de caña	Proesa™ Explosión de vapor	Celere-2L® Levadura recombinante	81.8	2014
Raizen Project (Iogen Corp.)	Sao Paulo, Brasil	Bagazo de caña	No disponible	Levadura recombinante	40	2014
Poet-DSM Advanced Biofuels	Iowa, EUA	Rastrojo de maíz	Ácido diluido	<i>S. cerevisiae</i> recombinante	75.7	2014
Abengoa	Kansas, EUA	Rastrojo de maíz	Ácido diluido	<i>S. cerevisiae</i> recombinante	94.6	2015
DuPont Industrial BioSciences	Iowa, USA	Rastrojo de maíz	Explosión de fibra con amoníaco	<i>S. cerevisiae</i> recombinante	113.6	2015

Se ha realizado una considerable investigación y desarrollo respecto al estado del arte en el diseño de biorrefinerías (por ejemplo: Girio et al., 2010; Moncada et al., 2016), intensificación de biorrefinerías (por ejemplo: Vaghari et al., 2015; Prado-Rubio et al., 2016), y algunas otras publicaciones con un enfoque sobre algunas evaluaciones para la intensificación de casos de estudio específicos. Por ejemplo, el caso en biorrefinerías más estudiado, es la producción de etanol 2G, el cual ha sido estudiado desde diferentes perspectivas, por mencionar algunas: análisis de la composición y disponibilidad de biomasa lignocelulósica en regiones locales (Hernández et al., 2019), evaluación y comparación de pretratamientos (Da Silva et al., 2016), nuevos equipos de reacción para IP (Antunes et al., 2018), evaluación de tecnologías para la recuperación de etanol (Gil et al., 2008), integración de calor en procesos (Nhien et al., 2017), análisis Pinch en masa, para la integración de las corrientes másicas (Martínez-Hernández et al., 2013), diseño conceptual y evaluación tecno-económica (Wooley et al., 1999; Aden et al., 2002), Análisis de Inventario y Análisis de Ciclo de Vida (ACV) (Wang et al., 2013), etc. Con esto se confirman las afirmaciones

que han hecho los autores antes mencionados (Lutze et al., 2010; Tian & Pistikopoulos, 2019), que el diseño y la síntesis de procesos se deben intensificar, y con ello, proponer herramientas de análisis para la generación y evaluación de alternativas estructurales eficientes. Sin embargo, faltan enfoques y herramientas sistemáticos para tomar decisiones sobre las soluciones más prometedoras de los procesos intensificados. Si bien se han informado varios estudios desde una perspectiva de IP, la mayoría se han realizado de forma aislada. Por lo que el principal aporte en este trabajo será la integración de varios aspectos de la IP, junto con la propuesta de un índice de intensificación global que se pueda utilizar para la evaluación del desempeño y la toma de decisiones.

En este trabajo, primero se presentan los aspectos más importantes del diseño y síntesis para la intensificación de las biorrefinerías, tomando en cuenta las principales etapas de una biorrefinería 2G (acondicionamiento de materia prima, pretratamiento, sacarificación, fermentación y recuperación del producto). De este modo, se propone una metodología con un enfoque sistemático para evaluar diferentes configuraciones de proceso mediante la definición de un criterio de intensificación global. Este criterio incorpora la evaluación de algunos indicadores de intensificación o variables de respuesta considerando factores importantes en el proceso, que a su vez impactan en la sostenibilidad del proceso, como el reducir los costos para aumentar la rentabilidad, reducir las emisiones de desechos para disminuir el impacto en la degradación de los ecosistemas, así como reducir el consumo de energía y el requerimiento de los servicios auxiliares (electricidad, vapor, agua de enfriamiento) para reducir el impacto climático. Finalmente, la metodología se emplea en los casos de estudio correspondientes a una biorrefinería 2G para la producción de etanol anhidro, en los cuales se establece la síntesis de diferentes configuraciones considerando alternativas tecnológicas maduras, se evalúan diseños a escala industrial y se comparan los indicadores de intensificación, así como el criterio de intensificación global que evalúa todos los casos. Como resultado, se analizaron 24 configuraciones, logrando identificar dos casos con el mejor desempeño.

1.1 Marco teórico

1.1.1 Ingeniería de sistemas de proceso e intensificación de procesos

La ingeniería de sistemas de proceso, también conocida como PSE por sus siglas en inglés, es una disciplina que integra metodologías y herramientas sistemáticas para el diseño de sistemas de procesos (Grossmann & Westerberg, 2000). Las aplicaciones del PSE han sido de gran importancia en la investigación y desarrollo, tanto para la academia como para la industria en áreas como el diseño, síntesis, simulación de procesos, diseño de productos, control, operación y optimización de procesos (Grossmann & Harjunkski, 2019).

La simulación, el diseño y la síntesis de procesos son áreas que desde principios de la segunda mitad del siglo XX se han desarrollado ampliamente y han contribuido en la investigación y desarrollo de procesos químicos y biotecnológicos. Como se menciona en el trabajo de Grossmann & Harjunkski (2019), el primer artículo sobre simuladores de proceso fue sobre SPEED-UP de Sargent & Westerberg (1964), y la primera publicación en el campo de la síntesis de procesos fue *Process Synthesis* de Rudd et al. (1973). Desde entonces se abrió la puerta al desarrollo de técnicas y metodologías para el diseño, síntesis y simulación de procesos, con el desarrollo de una variedad importante de simuladores modulares que han permitido probar y evaluar procesos químicos y biotecnológicos. En este sentido, este trabajo se basó en las herramientas del PSE y la intensificación de procesos para implementar y analizar un proceso intensificado.

Se han reportado diferentes enfoques para intensificar biorrefinerías o bioprocesos. Por ejemplo, Lutze et al. (2010) plantearon que las mejoras logradas en los procesos intensificados se pueden clasificar de acuerdo con cuatro principios asociados a la IP: integración de operaciones unitarias, integración de funciones, integración de fenómenos y mejora dirigida de un fenómeno de una operación dada. Por otro lado, Vaghari et al. (2015) propusieron métodos de intensificación de procesos divididos en dos principales áreas: intensificación de equipos (como nuevos reactores o intercambiadores de calor) y métodos de intensificación de procesos (como reactores multifuncionales, separaciones híbridas y energías alternativas). Mientras que Moncada et al. (2016) informaron que las estrategias de diseño para biorrefinerías sostenibles deben tener en

cuenta tres niveles principales: integración de calor, integración másica e intensificación de procesos.

1.1.2 Diseño y síntesis

Si bien la implementación de modelos y la resolución de balances de materia y energía pueden ser resueltos a través de una amplia variedad de herramientas computacionales por medio de métodos numéricos, o en ciertos casos de forma analítica, son parte fundamental dentro del análisis de un proceso. La generación de un proceso, como es el caso de una biorrefinería, con el objetivo de obtener algún producto de interés, puede generar una amplia gama de alternativas estructurales muy complejas. Por lo que es importante implementar una metodología que, de una forma sistemática, permita el diseño de procesos partiendo desde el desarrollo del diagrama de flujo hasta llegar a la simulación y análisis de las estructuras para su discriminación de las alternativas más apropiadas y determinar, hasta entonces, un solo proceso óptimo. Para ello se han desarrollado metodologías, desde un punto de vista heurístico, de diseño y síntesis de procesos, como la integración de la metodología o estrategia de la cebolla (Linnhoff & Townsend, 1982; Shenoy, 1995) y el enfoque con niveles jerárquicos presentada por Douglas (1988). Que, si bien siguen siendo de gran importancia en la génesis en el diseño y síntesis de procesos, pueden ser adaptadas o complementadas a las necesidades del ingeniero de proceso. Como es el caso de este trabajo, donde se busca complementar estas bases con una metodología para lograr una toma de decisiones dentro de un espacio de alternativas que, con base a ciertos criterios, se logren alcanzar la o las alternativas más adecuadas desde el punto de vista de intensificación de procesos, previa a la optimización. Ya que si bien la optimización puede ser el método más formal en la toma de decisión sobre qué tipo de proceso implementar a partir de algún criterio o criterios (problema multi-objetivo), ésta se puede ver complicada ante una superestructura de alternativas si no se hace una reducción previa a estas opciones de diseño.

Una de las principales etapas del diseño es la síntesis de procesos, donde se llevan a cabo las propuestas y desarrollo de las alternativas, así como el planteamiento de las condiciones de operación que pueden llegar a cumplir los objetivos planteados para el proceso. Scenna et al. (1999) señala que esta etapa del diseño involucra tomar decisiones en dos espacios, el de las

alternativas estructurales, y el de los diseños alternativos para las unidades de operación que componen cada módulo.

1.1.3 Materias primas lignocelulósicas

Las biomásas lignocelulósicas (BLC) o de segunda generación (2G), son el material más abundante y renovable en el mundo. Woiciechowski et al. (2013) reportan que se genera aproximadamente entre 150 y 170x10⁹ toneladas anuales de BLC, razón por la cual se le considera una solución sostenible para su uso en biorrefinerías.

Diversas materias primas han sido ampliamente investigadas, tal es el caso de los desechos sólidos municipales, maderas, bagazo de sorgo dulce, bagazo de caña de azúcar, paja de trigo, paja de maíz, bagazo de agave de la industria del tequila, entre otros (Rezania et al., 2020; Balan et al., 2013; Gómez et al., 2008). Este tipo de biomasa puede representar una opción viable para la producción de biocombustibles, ya que su uso puede ayudar a reducir la dependencia de combustibles fósiles y evitar el uso de materia prima de primera generación, la cual se puede confrontar con algunas situaciones sociales como la seguridad alimentaria. Según la Agencia Internacional de Energía (IEA, por sus siglas en inglés), la biomasa para uso energético representa aproximadamente el 14% del suministro total de energía del mundo (IEA, 2018). La biomasa lignocelulósica es una de las principales fuentes de hexosas y pentosas para fines energéticos. Proviene principalmente del sector agrícola, bosques e industria, donde los desechos agrícolas y los residuos forestales son las materias primas más prometedoras por su abundancia y relativo bajo costo (Cai et al., 2017). Sin embargo, a pesar de los puntos positivos que se tienen con respecto a la BLC, el procesamiento para recuperar las azúcares fermentables sigue representando un reto debido a la presencia de lignina y el grado de cristalinidad de la celulosa, por lo que requiere ser pretratada antes de poder ser utilizada como sustrato en la fermentación, lo que puede representar un aumento en los costos de operación.

1.1.4 Pretratamiento

Como ya se mencionó anteriormente, la BLC puede ser un recurso relativamente barato, sin embargo, por sus características estructurales, como el entrecruzamiento de los carbohidratos con la lignina, y el de nivel de cristalinidad de la celulosa, forman una barrera que evita una eficiente

y económica digestión enzimática, elevando los costos de procesamiento. Por tal motivo, a lo largo de varios años, se ha desarrollado una amplia investigación en el desarrollo de diferentes métodos que buscan separar los componentes estructurales de la BLC (Woiciechowski et al., 2013; Sun & Cheng, 2002).

El proceso de pretratamiento es una etapa clave en el proceso de producción de bioetanol 2G. Tiene el objetivo de romper la estructura heterogénea de la BLC para hacerla accesible a las enzimas hidrolíticas, con las que se obtienen las azúcares fermentables, por lo que el rendimiento del proceso depende en gran medida de esta etapa. Existen diferentes métodos de pretratamiento con diversos mecanismos para influir en la estructura de la biomasa lignocelulósica. Pretratamientos químicos (alcalino, ácido, líquidos iónicos, solventes orgánicos, etc.), físicos (explosión de vapor, microondas, etc.), biológicos (bacterias fúngicas), o la combinación de estos, han sido estudiados ampliamente en diversos trabajos (Rezania et al., 2020). En particular, el pretratamiento con ácido diluido es uno de los más utilizados a escala comercial (Pereira Ramos, 2003). Otro pretratamiento considerado para este trabajo es el pretratamiento hidrotérmico (PHT), también conocido como explosión de vapor o autohidrólisis, este es uno de los pretratamientos fisicoquímicos más estudiados y utilizados, en el que la biomasa se somete con vapor saturado y alta presión durante un período de tiempo comprendido entre segundos y varios minutos, finalmente el reactor es despresurizado súbitamente, lo que provoca una explosión en la BLC. El PHT combina fuerzas mecánicas y efectos químicos debido a la hidrólisis (autohidrólisis) de los grupos acetilo presentes en la hemicelulosa (Woiciechowski et al., 2013). Además, el agua también puede actuar como un ácido a altas temperaturas. Los efectos mecánicos son causados porque la presión se reduce repentinamente y las fibras se separan debido a la descompresión explosiva. En combinación con la hidrólisis parcial de la hemicelulosa y la solubilización, la lignina se redistribuye y, en cierta medida, se elimina del material. La eliminación de hemicelulosa expone la superficie de celulosa y aumenta la accesibilidad enzimática a las microfibrillas de celulosa.

1.1.5 Sacarificación y fermentación

La hidrólisis enzimática, también conocida como sacarificación, es una etapa posterior al pretratamiento, donde la celulosa conformada por polisacáridos se despolimeriza por medio de la

ruptura de los enlaces glucosídicos mediante enzimas conocidas como celulasas. La finalidad de esta etapa es hidrolizar los polisacáridos a monosacáridos (Balan et al., 2013).

La fermentación, donde los microorganismos se encargan de producir metabólicamente el producto deseado. Existen diferentes tipos de configuraciones en estos dos procesos, como son: sacarificación y fermentación separadas (*Separate Hydrolysis and Fermentation*, SHF), sacarificación y fermentación simultáneas (*Simultaneous Saccharification and Fermentation*, SSF), sacarificación y co-fermentación simultáneas (*Simultaneous Saccharification and Co-Fermentation*, SSCF), y bioproceso consolidado (*Consolidated bioprocessing*, CBP). En este trabajo se diseñó, con base a los reportes técnicos de la NREL (National Renewable Energy Laboratory, U.S. Department of Energy Laboratory), una configuración de SSCF.

La producción de etanol se realiza a partir de la fermentación de las azúcares fermentables, las cuales son utilizadas por los microorganismos (biocatalizadores) productores de etanol, para realizar el proceso metabólico del cual se obtiene el etanol. Se están desarrollando diversos tipos de microorganismos modificados, sin embargo, el costo de este tipo de cepas puede ser contraproducente en el costo unitario de producción (CUP), así como ciertas limitaciones en la robustez industrial, el uso del sustrato, la productividad y el rendimiento. Las levaduras son de los principales biocatalizadores industriales para producir biocombustibles, pero se están diseñando y desarrollando bacterias con gran potencial como *Escherichia coli*, *Zymomonas mobilis*, *Corynebacterium glutamicum* y *Bacillus subtilis* (Yang et al., 2016).

Z. mobilis es un microorganismo productor de etanol natural que tiene muchas características deseables como biocatalizador industrial, tales como alta productividad específica, alta tolerancia al alcohol, un amplio rango de pH para la producción (pH 3.5-7.5). A diferencia de *Saccharomyces cerevisiae*, la cual utiliza la ruta metabólica de Embden-Meyerhof-Parnas (EMP), *Z. mobilis* utiliza la ruta de Entner-Doudoroff (ED) Figura 1. Esta bacteria es un microorganismo anaeróbico facultativo, por lo que puede reducir costos de producción con respecto al control de aireación durante el proceso de fermentación. Tiene un mejor rendimiento de etanol debido a que lleva a cabo la fermentación con un 50% menos de ATP producido en relación con la vía de EMP. También el área superficial celular de *Z. mobilis* es altamente específica y consume glucosa más rápido que *S. cerevisiae*. Yang et al., (2016) menciona que *Z. mobilis* puede utilizar N₂ como fuente

de nitrógeno y así reemplazar al NH_4^+ o puede utilizar el suplemento industrial de nitrógeno denominado licor de maceración de maíz. En su trabajo también mencionan que se observó que la fijación de nitrógeno no afectó el rendimiento de etanol, sino que aumentó la productividad específica de etanol a menores cargas de biomasa, lo que podría reducir significativamente el costo de producción de etanol celulósico en millones de dólares anuales, aunque la utilidad de este proceso a escala industrial requiere una mayor investigación.

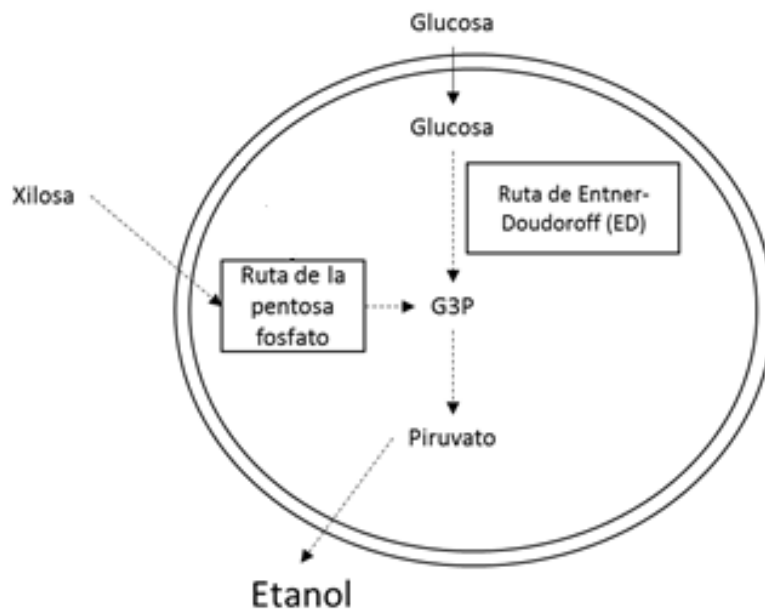


Figura 1. Flujo metabólico para la producción de etanol en *Zymomonas mobilis* (Adaptada de Yang et al., 2016).

1.1.6 Separación y purificación.

La destilación es un proceso de separación física de una mezcla que tienen puntos de ebullición diferentes, donde se separa preferencialmente los componentes más pesados de la mezcla. Cuando la mezcla líquida de materiales volátiles es calentada, el vapor saliente será más rico en el componente más volátil (básicamente el de menor punto de ebullición) que el líquido desde el cual se generó. A su vez, si un vapor es enfriado, el menos volátil (de mayor punto de ebullición) tendrá la tendencia a condensar en una proporción mayor que el material más volátil. La mezcla etanol-agua es una solución no ideal, por lo que no es posible separar totalmente en componentes puros mediante una simple destilación fraccionada, ya que presenta una relación

azeotrópica en 89.4% mol de etanol a 78.2 °C, temperatura mínima a la cual la solución puede entrar en ebullición, y a 1 atm de presión. Por lo tanto, el etanol solo puede ser purificado hasta aproximadamente 95% en volumen, conocido como etanol rectificado (Hua et al., 2007). Debido a que se busca obtener un etanol anhidro, es necesario utilizar otro método, como la destilación extractiva, o por medio de una adsorción con tamices moleculares (Purbasari et al., 2013).

La adsorción con tamices moleculares permite romper el azeótropo etanol-agua por medio de zeolitas, las cuales son aluminosilicatos cristalinos microporosos con una importante aplicación en los procesos de separación y purificación. Son usadas comúnmente y existen muchas composiciones y estructuras diferentes de acuerdo con el adsorbato (López et al., 2009; Chen et al., 2014). El principio básico de los tamices moleculares para adsorber y separar una mezcla de etanol-agua depende de los poros dispuestos regularmente y de un área superficial altamente específica dentro de los tamices moleculares. Esto permite que las moléculas de agua cuyo diámetro es de aproximadamente 2.8 Å sean adsorbidas en los poros, separando así el agua del etanol, que tiene un diámetro molecular mayor, de aproximadamente 4.46 Å, logrando su deshidratación. La deshidratación del etanol se puede lograr usando tamices moleculares de tipo 3A y 4A como adsorbente, en el que el diámetro de los poros dispuestos regularmente se aproxima a 3 Å o 4 Å. Además, los tamices moleculares son hidrófilos y debido a su mayor afinidad por el agua que por el etanol, aumenta la eficacia de la deshidratación. Los estudios han demostrado que la aplicación de esta técnica para separar agua con etanol logra una buena eficiencia. Al-sheh et al. (2004) reportan que el tamiz molecular 3A muestra una mejor captación de agua que los tipos 4A y 5A debido a su área superficial específica más alta (Chen et al., 2014).

La destilación extractiva es una buena alternativa debido a los bajos consumos energéticos. Por otra parte, los solventes a emplear no son peligrosos, entre los cuales destacan por ser más utilizados: propilenglicol, etilenglicol y glicerol; estos compuestos alteran las volatilidades relativas de los componentes de la mezcla. Debido a su baja volatilidad, tienden a permanecer en la fase líquida, razón por la cual se alimentan en una de las etapas superiores, para que su efecto sea a lo largo de toda la columna (Lauzurique et al., 2016).

1.2 Objetivos

Objetivo general

Proponer una metodología para la evaluación de diferentes configuraciones de procesos intensificados de una biorrefinería 2G para la producción de etanol lignocelulósico anhidro, con un enfoque en los aspectos de diseño y síntesis de procesos.

Objetivos particulares

- Desarrollar el diseño y síntesis de las estructuras alternativas técnicamente factibles para una biorrefinería de bagazo de caña de azúcar para la producción de etanol anhidro.
- Implementar las posibles integraciones de las operaciones unitarias.
- Implementar las posibles integraciones de masa.
- Realizar el análisis de integración de calor por el método Pinch.
- Analizar y evaluar los resultados correspondientes a los objetivos de intensificación.

1.3 Organización de la tesis

En este capítulo se han presentado los antecedentes y objetivos de la tesis. En el capítulo 2, se describe la metodología que se llevó a cabo para alcanzar los objetivos planteados en este trabajo, tomando en cuenta cada etapa del desarrollo del proyecto. En el capítulo 3 se presentan los resultados del análisis realizado a cada uno de los factores propuestos para la intensificación del proceso, y se analizan las variables de resultado, las cuales corresponden a los criterios de intensificación seleccionados para la toma de decisiones en el proceso de diseño y síntesis. Finalmente, en el capítulo 4 se discuten los resultados globales del análisis, donde se comparan los casos de estudio con respecto a sus variables de resultado, concluyendo con los casos que presentan los mejores rendimientos globales.

2 METODOLOGÍA

2.1 Diseño conceptual de la biorrefinería

El concepto que engloba una biorrefinería 2G implica la conversión de biomasa lignocelulósica en productos bioquímicos y/o biomateriales, como por ejemplo biocombustibles, enzimas, ácidos orgánicos, biopolímeros, entre otros. Aun cuando el diseño conceptual de una biorrefinería 2G implica el uso de diversas posibles materias primas o una combinación de éstas, el proceso de producción involucra una variedad de opciones tecnológicas para el procesamiento aguas arriba, el proceso de conversión, y el proceso aguas abajo. Por tanto, el diseño conceptual de una biorrefinería 2G se puede dividir principalmente en 5 secciones (Ver Figura 2): (1) acondicionamiento de la materia prima lignocelulósica, donde se lleva a cabo, principalmente, la reducción del tamaño de la partícula; (2) pretratamiento, donde se rompe la BLC en sus principales componentes (celulosa, hemicelulosa y lignina) y se presenta una hidrólisis parcial de los polisacáridos; (3) sacarificación, aquí los polisacáridos de celulosa y hemicelulosa se descomponen en monosacáridos (principalmente glucosa y xilosa); (4) fermentación, donde los azúcares fermentables, por medio de microorganismos, son convertidos en el o los productos de interés; y (5) recuperación del producto, donde el producto se separa, concentra y purifica. A pesar de la gran cantidad de tecnologías, para los procesos, investigadas y reportadas, Chandel et al. (2018) concluyeron que la inmadurez técnica de los procesos es el principal inconveniente en la implementación exitosa de biorrefinerías 2G, ya que un proceso maduro que se puede implementar a escala comercial con indicadores económicos competitivos aún no está disponible.

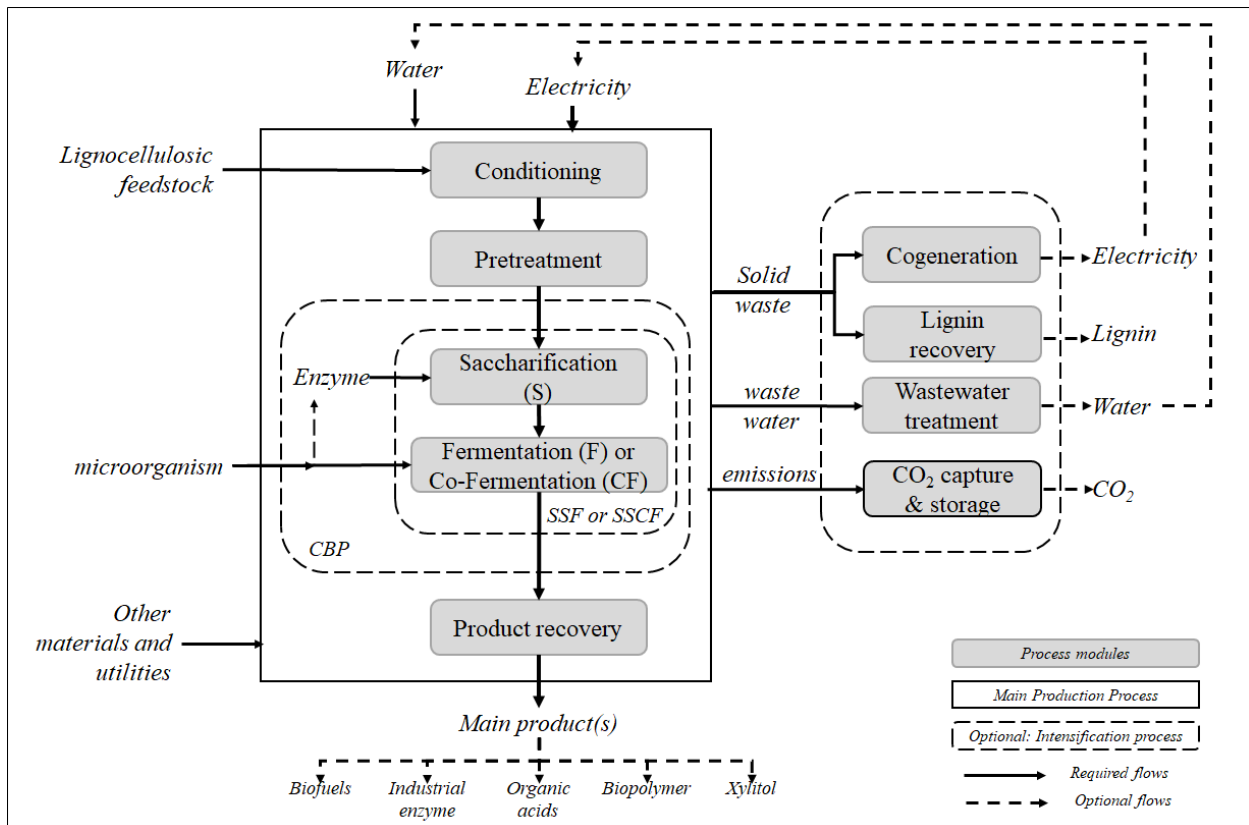


Figura 2: Diseño conceptual para una biorrefinería lignocelulósica.

Teniendo en cuenta estos conceptos, el objetivo de este trabajo es abordar el análisis para la toma de decisiones dentro del área de la ingeniería asistida por computadora, para la intensificación de una biorrefinería 2G, utilizando aspectos de diseño y síntesis de procesos. La metodología de IP propuesta incorpora cuatro aspectos principales: (a) integración de operaciones unitarias, (b) integración de masa, (c) análisis de integración de calor, y finalmente (d) la evaluación de los objetivos de intensificación. Teniendo en cuenta que los principales aspectos a cubrir en este trabajo son: procesos más simplificados, menor consumo de energía, menor desperdicio, menores costos operativos, mayor productividad, mayor capacidad y flexibilidad.

2.1.1 Integración de operaciones unitarias

Como se mencionó anteriormente, el diseño conceptual de una biorrefinería 2G consta de cinco principales secciones (acondicionamiento, pretratamiento, sacarificación, fermentación y recuperación de producto), y para cada uno de ellos existen diferentes tecnologías que se pueden implementar. Por lo tanto, desde el punto de vista del proceso de síntesis, se podrían proponer

muchas alternativas diferentes (es decir, configuraciones de síntesis) para el diseño conceptual de una biorrefinería. Este aspecto de la síntesis se abordará en la siguiente sección de manera particular para el caso de estudio de la producción de etanol lignocelulósico. Específicamente en esta sección se presentan algunos aspectos a considerar para cada operación unitaria desde el punto de vista del diseño de procesos. Por lo tanto, integrar operaciones unitarias implica el cómo hacer que una o más operaciones unitarias sean más compactas y efectivas, con menores costos de adquisición y operación (incluido el consumo de calor y electricidad, eliminación de desechos, etc.). Por lo tanto, cada una de las principales secciones de la biorrefinería se analizaron brevemente desde este punto de vista.

Como la sección de acondicionamiento de la materia prima es principalmente para reducir el tamaño de partícula, esta sección no se ha informado como un cuello de botella técnico-económico. Por tanto, su diseño es estándar y consta de pasos alternados de trituración y cribado. Los detalles del diseño de acondicionamiento se presentarán en la descripción del caso de estudio.

Se ha reportado que el pretratamiento es la etapa clave en las biorrefinerías 2G, debido a que de ésta depende en gran medida el rendimiento de los azúcares para la fermentación y por consecuencia el rendimiento de la producción del proceso, sin embargo, es la etapa con la mayor inmadurez técnica (Chandel et al., 2018). A pesar de que existe una amplia variedad de tecnologías para el pretratamiento físico, químico, fisicoquímico y biológico; el desarrollo de tecnologías eficientes e innovadoras aún está en desarrollo. Cada tecnología tiene sus pros y sus contras en términos: técnico (por ejemplo, la generación de productos secundarios o inhibidores para las siguientes reacciones), operativo (por ejemplo, la necesidad de procesos adicionales, como la neutralización), ambiental (como la cantidad de gases, de líquido o residuos sólidos generados), y económicos (principalmente costos operativos por consumo de servicios auxiliares y electricidad). Así, la intensificación de esta sección se puede realizar evaluando algunas de las tecnologías reportadas de manera integral a la biorrefinería, es decir, no evaluando la sección de pretratamiento de forma aislada, sino en conjunto con la síntesis completa de la biorrefinería 2G.

En la etapa de sacarificación, la celulosa y la hemicelulosa son hidrolizadas por enzimas comerciales y convertidas en glucosa y xilosa respectivamente. Mientras que, en la etapa de fermentación, las hexosas (principalmente glucosa) y las pentosas (principalmente xilosa) son

transformadas en el producto deseado por medio microorganismos especializados. En particular, los recientes desarrollos en biotecnología han permitido intensificar las conversiones en las etapas de sacarificación y fermentación, mediante el desarrollo de cócteles de enzimas y microorganismos recombinantes (ver Figura 2). Existen diferentes tecnologías que permiten la intensificación de estos dos procesos en conjunto (Girio et al., 2010): (a) cuando estas etapas se realizan por separado, y solo se fermentan las hexosas, el proceso se denomina hidrólisis y fermentación separadas (SHF); (b) cuando estas etapas se llevan a cabo por separado y fermentan tanto las pentosas como las hexosas, el proceso se denomina hidrólisis y co-fermentación separadas (SHCF); (c) cuando ambas etapas se realizan simultáneamente, y solo se fermentan las hexosas, el proceso se denomina sacarificación y fermentación simultánea (SSF); (d) cuando ambas etapas se realizan simultáneamente, y fermentan tanto las pentosas como las hexosas, el proceso se denomina sacarificación y co-fermentación simultáneas (SSCF), y (e) por último, se denomina bioprocésamiento consolidado (CBP) cuando un SSCF y además la producción de enzimas ocurre durante el mismo proceso. A pesar de que la CBP es el proceso con mayor grado de intensificación, su aplicación no ha alcanzado la madurez para ser implementada industrialmente (Prado-Rubio et al., 2016).

Finalmente, la recuperación del producto, o el procesamiento aguas abajo, puede incluir varios pasos (como separación, extracción, concentración, secado, cristalización y purificación). De modo que las estrategias para intensificar la recuperación del producto incluyen: (a) reemplazar tecnologías que consumen mucha energía (por ejemplo, destilación convencional) con tecnologías de baja energía (por ejemplo, extracción, absorción, adsorción, separación por membranas) (Chandel et al., 2018), las cuales son tecnologías utilizadas con éxito en la industria; o (b) implementar tecnologías nuevas e innovadoras para intensificar las separaciones híbridas (p. ej., absorción por membranas, destilación por membranas y destilación por adsorción) (Vaghari et al., 2015), sin embargo, estas tecnologías están en desarrollo. Similar a las tecnologías de pretratamiento, cada tecnología de purificación tiene ventajas y desventajas técnicas, operativas, ambientales y económicas. Por lo tanto, nuevamente se sugiere no evaluar la sección aguas abajo de forma independiente, sino en conjunto con la síntesis completa de la biorrefinería 2G.

2.1.2 Análisis de integración de calor

Hoy en día, la integración de calor (IC) es una parte fundamental del diseño y la síntesis de procesos, ya que tiene implicaciones favorables con respecto al consumo de energía, los costos operativos y el impacto ambiental. La IC es parte en el desarrollo de la síntesis del proceso, la cual puede seguir una metodología jerárquica representada por un diagrama de cebolla (Kemp, 2007): donde, desde el interior hacia el exterior de la cebolla, la metodología de síntesis del proceso comienza con las etapas de reacción como núcleo del diagrama de cebolla; la siguiente capa es el procesamiento aguas abajo, cuyo diseño está regulado por la composición de la corriente con el producto de la reacción; luego, en la última capa, se determinan las tareas de calentamiento y enfriamiento, así como la red de intercambio de calor y la recuperación de calor. En este último, la IC juega un papel importante en el proceso de diseño, ya que la red de intercambio de calor debe ser analizada y optimizada, y la recuperación máxima de energía debe determinarse mediante una metodología sistemática basada en principios termodinámicos denominada análisis Pinch. Una descripción conceptual de la metodología Pinch puede ser consultada en Kemp (2007). Sojitra (2016) afirmó que su efectividad para determinar la recuperación máxima de energía depende de la metodología seleccionada, por lo que reporta un novedoso algoritmo para minimizar las dificultades del diseño de procesos al implementar la IC.

2.1.3 Integración de masa

La integración de masa ofrece oportunidades prometedoras en términos de recuperación y reciclaje de algunas materias primas y sus derivados del proceso, obtención de productos secundarios a partir de los desechos generados en los procesos, reducción de gases de efecto invernadero o generación de electricidad y vapor para reducir la demanda de servicios auxiliares de la biorrefinería. Como se muestra en la Figura 2, se pueden incorporar módulos opcionales para intensificar la biorrefinería, tales como:

- módulo de cogeneración, donde se queman residuos sólidos para la producción de electricidad y vapor;
- recuperación de lignina, aunque la lignina es un excelente recurso para la cogeneración, puede purificarse para su uso posterior en otras aplicaciones especializadas;
- tratamiento de aguas residuales, para reciclaje de agua y producción de biogás;

- captura, purificación y almacenamiento de CO₂;
- producción de xilitol, cuando solo las hexosas se convierten en el producto principal en la etapa de fermentación, entonces la pentosa podría fermentarse para producir xilitol; etc.

De una manera más rigurosa, el análisis Pinch podría implementarse para la integración de masa. Por ejemplo, Martínez-Hernández et al. (2013) presentaron un enfoque de integración del producto principal (bioetanol) basado en el análisis Pinch másico y diseño de redes de intercambio de productos formados en una biorrefinería, resultando útil para evaluar opciones de mejora de procesos o eliminación de cuellos de botella.

2.2 Evaluación de los objetivos de intensificación

Como se mencionó en la introducción, se ha prestado poca atención a la evaluación integral y la comparación de procesos intensificados. Sin buenas comparaciones del desempeño técnico, energético, económico y ambiental de diferentes configuraciones de procesamiento, no se podrían tomar decisiones racionales entre ellas. También hay que tener en cuenta que, como señalan varios autores, un proceso intensificado es un proceso más simple, más seguro, más barato, más limpio (en términos de residuos generados), y más eficiente energéticamente. Por ello, más adelante se proponen algunos criterios para medir estos aspectos, y al final, se propone un criterio global como medida de la intensificación del proceso, para que pueda ser utilizado como referencia para la toma de decisiones en la etapa inicial del diseño y síntesis de una biorrefinería.

2.2.1 Evaluación económica

Los criterios económicos representan un elemento esencial de la rentabilidad del proceso, principalmente en las etapas de síntesis y diseño del proceso, y permiten comparar y tomar decisiones cuando existen diferentes escenarios posibles. El análisis de rentabilidad se puede realizar con base en índices de rentabilidad o medidas de flujo de caja descontado (FCD) (Seider et al., 2009). Por un lado, los índices de rentabilidad son indicadores financieros que se utilizan para medir y evaluar la capacidad de generar ganancias en relación con los ingresos, los activos del balance, los costos operativos y la inversión de capital durante un período de tiempo específico. Se utilizan para proporcionar información útil sobre el bienestar financiero, el rendimiento del

negocio, y también se utilizan para estimaciones preliminares al comparar alternativas durante las primeras etapas del diseño del proceso, especialmente durante la síntesis del proceso. Los índices de rentabilidad más comunes son el costo unitario de producción (CUP), la tasa interna de retorno (TIR) y el período de recuperación (PDR). Por otro lado, también se pueden emplear medidas más rigurosas como la de FCD para permitir que la administración tome una decisión final con respecto a la viabilidad financiera de una inversión potencial. Las medidas de FCD implican la consideración del valor temporal del dinero y estiman el valor de una inversión en función de su flujo de caja futuro. Los métodos FCD más populares son el valor presente neto (VPN) y la tasa interna de retorno (TIR). En particular, el VPN es el valor de todos los flujos de efectivo futuros durante toda la vida útil de una inversión, descontados al presente por medio de una tasa de descuento definida. Mientras que la TIR es la tasa de rendimiento cuando el valor presente neto es igual a cero. En el caso de una inversión en la que se obtienen flujos de efectivo a partir del costo de venta del producto y una tasa de descuento definida, se busca un VPN mayor que cero, lo que representaría una inversión viable con respecto a la tasa de descuento esperada.

En este trabajo se propone como criterio económico el costo unitario de producción (CUP), el cual se determinará a partir del método $VPN = 0$ (ver detalles en Sánchez et al., 2013). De modo que la tasa de descuento (i) fue fijada en un 4%, con un periodo para la vida útil de la planta de 15 años. El CUP se realizó con un cálculo iterativo:

$$VPN = \frac{c[(1+i)^n - 1]}{i(1+i)^n} + \frac{C_{WC}}{(1-i)^n} - C_I = 0 \quad (1)$$

$$C = C_{in} - C_{out} + D \quad (2)$$

$$C_{in} = (\text{producción anual})(CUP) + (\text{excedente de electricidad})(CUE) \quad (3)$$

$$C_{out} = (CDP) + (\text{impuestos}) + (\text{costo financiero}) \quad (4)$$

Donde C = flujo de efectivo, C_{WC} = capital de trabajo, C_I = inversión inicial, n = vida de la planta, D = depreciación, CUE = costo unitario de electricidad, CDP = costo directo de producción.

Es importante señalar que, por medio de este método, la tasa de descuento elegida es directamente la TIR, por lo que la selección de ésta representa la tasa de rendimiento total esperada en el periodo seleccionado. En este trabajo la tasa de descuento seleccionada se basa en un

promedio del histórico de inflaciones anuales en México, proyectando así un CUP con el cual no existen ni pérdidas ni ganancias en todo el periodo de vida útil. Este método permite la flexibilidad de modificar la tasa de descuento en el país en el que se desea realizar el análisis de manera local.

2.2.2 Evaluación de energía

Por un lado, la mitigación y adaptación al cambio climático son desafíos clave en la actualidad. En el centro de estos desafíos se encuentra el consumo mundial de energía y la dependencia de los combustibles fósiles. Por lo tanto, existe la necesidad de utilizar la energía de manera eficiente para tener éxito en el objetivo de disminuir el calentamiento global. Por otro lado, con el aumento de los costos de energía se impacta directamente en el costo unitario de producción (*CUP*), además de ampliar el balance entre la oferta y demanda de energía, se anima a las industrias a ahorrar energía sumado el uso de múltiples fuentes de energía, así como un uso más eficaz.

Para las biorrefinerías, el consumo de energía proviene de los servicios auxiliares de proceso (es decir, los requerimientos de calentamiento, refrigeración y electricidad) que son esenciales para lograr una temperatura de corriente específica o para operar cualquier equipo. La cantidad de servicios necesarios para el proceso (como el flujo másico de vapor, agua de enfriamiento y el consumo de electricidad) se puede calcular como parte de las evaluaciones de los balances de masa y energía del proceso. Estas cantidades se pueden utilizar para determinar los servicios energéticos requeridos por el proceso. También, se puede evaluar la recuperación de energía en la biorrefinería: (a) utilizando análisis Pinch e integración de calor para los servicios de calefacción y refrigeración, y (b) calculando la electricidad generada en la etapa de cogeneración y considerando su reutilización dentro del proceso. La integración energética total puede conducir a una reducción en el consumo de servicios auxiliares y, por lo tanto, también a una reducción en el *CUP*.

Otra medida de la eficiencia energética del proceso es la tasa de retorno energético (EROI, por sus siglas en inglés, *energy return on investment*)), la cual evalúa la relación de la energía entregada por el proceso entre la demanda de energía requerida por el proceso, según la Ec. (5) (Salim et al., 2019):

$$EROI = \frac{\text{Energía entregada por el proceso}}{\text{Demanda de energía requerida por el proceso}} \quad (5)$$

Donde la demanda de energía requerida por el proceso significa la cantidad de energía necesaria para la operación del proceso. En general, un EROI > 1 es un resultado favorable, lo que significa que la producción del proceso considerado no es un sumidero de energía. Cuanto mayor sea el EROI, mayor será la eficiencia del proceso. Sin embargo, según la literatura, el valor EROI debe tener un valor mínimo de 3 para ser considerado un proceso energéticamente sostenible. Se ha encontrado que la metodología EROI es adecuada para comparar fuentes de biomasa convencionales e innovadoras para bioenergía; de hecho, se informó que varios casos de materias primas 2G para biocombustibles tenían mejores valores de EROI que las materias primas 1G (Salim et al., 2019).

2.2.3 Evaluación de residuos y emisiones

Las emisiones a la atmósfera y la eliminación de residuos contaminantes en el agua y el suelo son un problema que aumenta exponencialmente e interrumpe los ciclos ecológicos naturales. Dado que uno de los objetivos de la IP es reducir los residuos industriales, en este trabajo se proponen las cantidades directas de estos efluentes por unidad de masa (o volumen) del producto principal como criterio ambiental para comparar las diferentes configuraciones. En particular, en una biorrefinería, las principales corrientes de contaminantes son las aguas residuales (aguas residuales que son el resultado de la interacción del agua dulce con las materias primas y los productos traza que quedan del proceso), los residuos sólidos (sólidos que quedan de la fermentación y los lodos de las aguas residuales en el tratamiento) y gases de efecto invernadero (principalmente CO₂ producido en las etapas donde ocurren las reacciones de fermentación o combustión).

Por supuesto, se podrían utilizar otras evaluaciones ambientales rigurosas, como la Evaluación del Ciclo de Vida (ECV) y el algoritmo de reducción de desechos (WAR por sus siglas en inglés). La ECV es un análisis de impacto ambiental para informar sobre las posibles cargas ambientales y los recursos consumidos en cada paso de la cadena de suministro de un producto o servicio. Sin embargo, la mayoría de los estudios de ECV de biorrefinerías se han centrado en la emisión de Gases de Efecto Invernadero GEI (es decir, CO₂) y la energía, por lo que no se han considerado otros tipos de residuos con impacto ambiental (Salim et al., 2019). Mientras que el algoritmo WAR (Young & Cabezas, 1999) propone un índice global del potencial de impacto

ambiental (*Potential Environmental Impact*, PEI), calculado a partir de ocho índices individuales que consideran dos categorías principales: (1) la categoría atmosférica global incluye el potencial de calentamiento global (*Global Warming Potential*, GWP), potencial de agotamiento del ozono (*Ozone Depletion Potential*, ODP), potencial de acidificación o lluvia ácida (*Acidification Potential*, AP) y potencial de oxidación fotoquímica o formación de smog (*Photochemical Oxidation Potential*, PCOP); y (2) la categoría de impacto toxicológico local incluye potencial de toxicidad humana por ingestión (*Human Toxicity Potential by Ingestion*, HTPI), potencial de toxicidad humana por inhalación o exposición dérmica (*Human Toxicity Potential by Inhalation or Dermal Exposure*, HTPE), potencial de toxicidad acuática (*Aquatic Toxicity Potential*, ATP) y potencial de toxicidad terrestre (*Terrestrial Toxicity Potential*, TTP). Sin embargo, estos dos métodos requieren mucha información, mucho tiempo y muchos recursos para recopilar, aunque existe software especializado para realizar estas evaluaciones (por ejemplo, SimaPro ® para ECV o software WAR GUI ©).

Vale la pena mencionar que, al comparar biorrefinerías basadas en evaluaciones ambientales, se podría recomendar el algoritmo ECV y WAR para contrastar diferentes tipos de biorrefinerías (por ejemplo, una biorrefinería de etanol y una biorrefinería de butanol). Pero no podría ser significativo para la toma de decisiones equiparar diferentes configuraciones de un mismo tipo de biorrefinería (lo que corresponde al caso de estudio que se presentará en la siguiente sección).

2.2.4 Criterio global de intensificación

La selección del número y tipo de criterios (es decir, aspectos técnicos, económicos, energéticos, ambientales, incluso sociales) para evaluar y comparar el desempeño de los procesos intensificados, dependerá de los objetivos del proyecto en estudio. En este trabajo se proponen y categorizan tres criterios de la siguiente manera:

- a) Criterio económico (Y_I). Este criterio se define directamente como el costo unitario de producción ($Y_I = CUP$), que se obtiene a partir de un cálculo iterativo de la siguiente ecuación (consulte las ecuaciones (1) - (4)) en la Sección 2.1):

$$VPN = 0 \tag{6}$$

b) Criterio energético (Y_2). Como se menciona en la Sección 2.2.2, el consumo neto de energía proviene de los requerimientos de los servicios auxiliares (calefacción, refrigeración y electricidad) para el proceso, restando el calor integrado y la electricidad generada. Por tanto, el rendimiento del consumo de energía (Y_2) se define de la siguiente manera:

$$Y_2 = \frac{\textit{tasa neta de energía consumida}}{\textit{tasa de producción del producto}} \quad (7)$$

c) Criterio de residuos (Y_3). Como se indica en la Sección 2.2.3, los tres principales desechos contaminantes de la biorrefinería son las aguas residuales, los desechos sólidos y las emisiones de CO₂. Por lo tanto, se considerará una tasa acumulativa de todos los residuos para evaluar el rendimiento de residuos totales (Y_3):

$$Y_3 = \frac{\textit{tasa acumulativa de todos los desechos}}{\textit{tasa de producción del producto}} \quad (8)$$

Por lo tanto, cuanto menor sea el Y_1 , mayor será la rentabilidad; cuanto menor sea el Y_2 , mayor será la eficiencia energética; cuanto menor sea Y_3 , menor contaminación ambiental. Es decir, a menores valores en los rendimientos (Y_1, Y_2, Y_3), mayor eficiencia en los objetivos de la intensificación del proceso evaluado.

Debido a la naturaleza multi-objetivo de la IP, todos los indicadores o métricas deben compararse y sopesarse entre sí para evaluar diferentes configuraciones de procesos y decidir cuál de ellas presenta el mejor rendimiento (Lutze et al., 2010). Luego, para valorar los tres criterios de desempeño propuestos, primero se normalizaron con respecto al desempeño más grande en cada categoría. De tal manera que el criterio de intensificación global (Y_{int}) se calcula de acuerdo con:

$$C_{i,j} = \frac{Y_{i,j}}{Y_{i,j}^{max}} \quad 0 \leq C_{i,j} \leq 1 \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, n \\ j = 1, \dots, m \end{array} \quad (9)$$

$$Y_{int,j} = \sum_{i=1}^n w_i C_{i,j} \quad \sum_{i=1}^n w_i = 1 \quad \begin{array}{l} n = 3 \\ m = 24 \\ 0 \leq Y_{int,j} \leq 1 \end{array} \quad (10)$$

Donde los pesos (w_i) dependen del sector industrial, los intereses propios de los inversionistas, las regulaciones económicas, políticas y ambientales del país, etc. Entonces el criterio de intensificación global puede usarse para tomar decisiones durante la síntesis y diseño de una biorrefinería (o cualquier otro proceso industrial). De tal manera que, a menores valores del criterio ($Y_{int} \rightarrow 0$), el proceso tendrá mejor desempeño y mayor intensificación; mientras que el proceso con el peor rendimiento tendrá valores de Y_{int} cercanos a 1.

Es importante destacar que la selección de criterios económicos, energéticos y de residuos debe definirse según cada caso de estudio, teniendo en cuenta las consideraciones establecidas en los apartados anteriores. Por lo tanto, la definición, los pesos adecuados y la evaluación de estos criterios deben realizarse de tal manera que reflejen una evaluación integral de la biorrefinería o cualquier otro proceso industrial en estudio.

3 CASO DE ESTUDIO: BIORREFINERÍA 2G PARA LA PRODUCCIÓN DE ETANOL ANHIDRO

Se ha seleccionado como caso de estudio una biorrefinería 2G para la producción de bioetanol debido a que el etanol es un producto químico convencional y es el biocombustible más utilizado en el sector de autotransporte en todo el mundo, existen tecnologías maduras para los procesos involucrados, enzimas y microorganismos robustos reportados para transformar azúcares (pentosas y hexosas) en etanol.

En las últimas décadas, se han realizado esfuerzos para desarrollar tecnologías eficientes y rentables para reducir los costos de producción de bioetanol. Así, varias empresas instalaron con éxito plantas de demostración a gran escala (ver Tabla 1), con una capacidad instalada entre 50 - 115 millones de litros por año. Rosales-Calderón & Arantes (2019) informaron que el precio de venta estimado más bajo del bioetanol 2G entre estas plantas fue el del Proyecto Raizen (\$ 0.57 por litro). Sin embargo, el costo de producción actual del bioetanol 2G debe reducirse para competir comercialmente con el bioetanol 1G y los combustibles fósiles. Por lo tanto, este desafío podría lograrse intensificando el proceso de producción.

En este trabajo, el análisis de intensificación de la biorrefinería 2G se basa en la definición de varias configuraciones (ver Figura 3) para mostrar, analizar y evaluar diferentes niveles de intensificación. El diseño conceptual de la biorrefinería está basado en los informes técnicos del NREL, cuyo diseño convencional incluye las etapas del proceso descritas más adelante (Wooley et al., 1999; Aden et al., 2002). Cabe mencionar que los informes técnicos de NREL presentaron un diseño de biorrefinería convencional que incluye manejo de materia prima, pretratamiento con ácido diluido, SSCF, separación por destilación, deshidratación de etanol por adsorción en tamices moleculares, sin análisis de integración de calor.

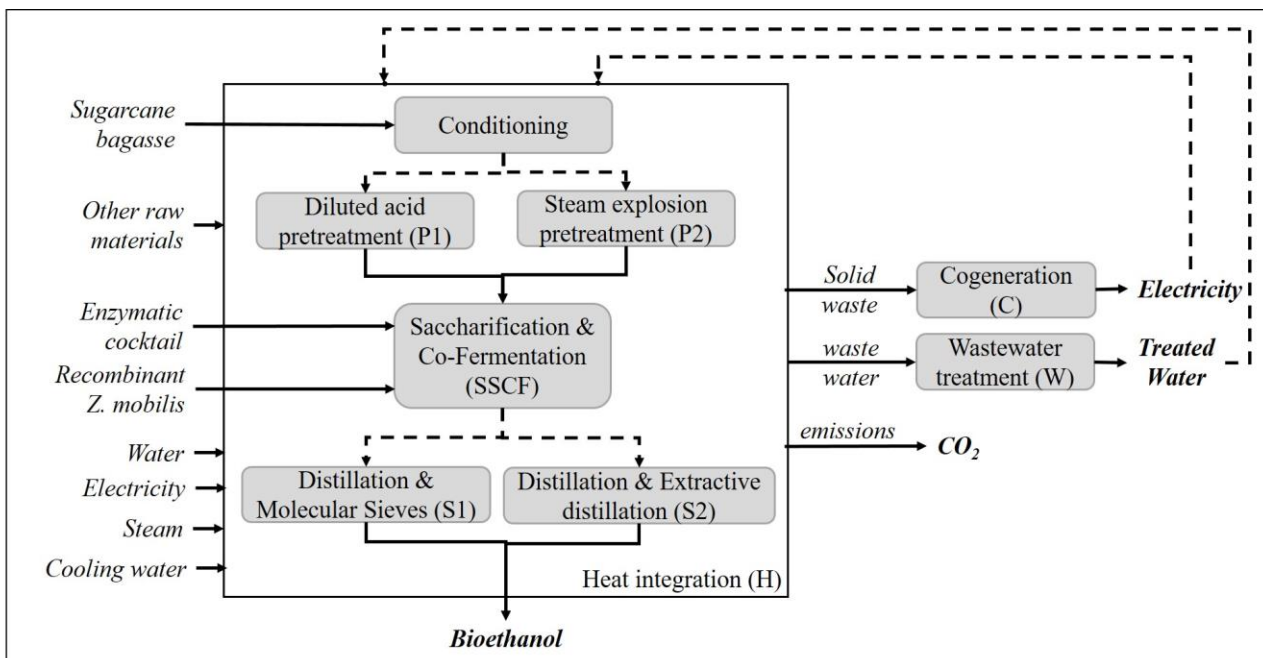


Figura 3. Diseño conceptual para el proceso de producción de ethanol 2G.

En particular, se seleccionó el bagazo de caña de azúcar como materia prima lignocelulósica debido a que, en los ingenios azucareros, el azúcar es el producto principal y el bagazo de caña de azúcar es un residuo que se usa comúnmente para generar energía por medio de combustión. Así, el uso de bagazo para biorrefinerías 2G es una oportunidad potencial para mejorar la rentabilidad y sostenibilidad de la industria azucarera, principalmente en países tropicales. Para fines de simulación, la composición en base seca utilizada para el bagazo de caña de azúcar se muestra en la Figura 4 (Hernández et al., 2019).

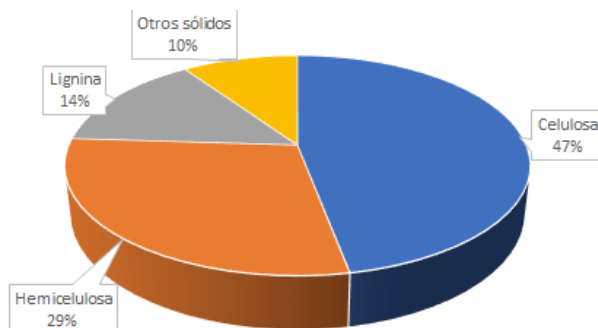


Figura 4. Composición del bagazo de caña de azúcar (Hernández et al., 2019).

A efectos de análisis y comparación, se consideran dos pretratamientos diferentes y dos procesos de separación. Se han seleccionado pretratamientos de explosión de vapor y ácido diluido ya que se informa que estos pretratamientos son los más eficientes para el bioetanol 2G (Girio et al., 2010) y también se han utilizado industrialmente (ver Tabla 1). Si bien para los procesos de separación es importante aclarar que la sección de recuperación de etanol se divide en dos pasos: primero, la corriente proveniente de SSCF se separa cerca del punto azeotrópico etanol-agua, utilizando dos columnas de destilación convencionales. Luego, se lleva a cabo un proceso de deshidratación para obtener el etanol anhidro (para uso como biocombustible). Para esto último, existen varias tecnologías, entre las que se encuentran: destilación al vacío, destilación azeotrópica, destilación extractiva, adsorción con tamices moleculares, pervaporación y procesos híbridos. Para este trabajo se ha seleccionado la adsorción con tamices moleculares y la destilación extractiva como procesos de deshidratación de etanol, debido a que se ha reportado que estos procesos han logrado un menor consumo energético (Gil et al., 2008).

Para fines de análisis y comparación, las primeras cuatro configuraciones básicas se definen en función de las cinco secciones principales (acondicionamiento, pretratamiento, sacarificación, fermentación y separación-purificación) para producir etanol:

- La configuración (P1S1) es una biorrefinería de etanol 2G clásica cuyo diseño emplea un pretratamiento con ácido diluido (llamado Pretratamiento 1, P1), y la separación-purificación del etanol se realiza por destilación para concentrar el etanol seguido de adsorción con tamices moleculares para deshidratar el etanol (llamado Separación-purificación 1, S1).
- La configuración (P1S2) es similar a la configuración P1S1, pero usando Separación-purificación 2 (S2) correspondiente a destilación (para concentrar el etanol) seguida de destilación extractiva (para deshidratar el etanol).
- La configuración (P2S1) es similar a la configuración S1P1, pero utiliza el pretratamiento 2 (P2) que corresponde al pretratamiento por explosión de vapor.
- La configuración (P2S2) utiliza Pretratamiento 2 y Separación-purificación 2.
- Luego se modifican estas cuatro configuraciones para hacer la integración masiva:

- Las configuraciones $PiSj-W$ ($i, j = 1, 2$) incluyen un módulo de tratamiento de aguas residuales (W), por lo que un subproducto reciclable es el agua tratada.
- Las configuraciones ($PiSj-WC$) incluyen tanto el tratamiento de aguas residuales (W) como la cogeneración (C), de modo que el agua tratada se recicla y los residuos sólidos se queman para producir y reciclar electricidad y vapor.
- Finalmente, las configuraciones ($PiSj-WCH$) corresponden a todas las anteriores, incluida la integración de calor (H).

En resumen, la nomenclatura utilizada para todas las configuraciones es $PiSj-WCH$ ($i, j = 1, 2$), donde P = pretratamiento, S = separación, H = integración de calor, W = tratamiento de aguas residuales, C = cogeneración. Por lo tanto, se analizarán y evaluarán 24 configuraciones en total (como se muestra en la Figura 3): $PiSj$ (4 casos), $PiSj-H$ (4 casos), $PiSj-W$ (4 casos), $PiSj-WH$ (4 casos), $PiSj-WC$ (4 casos) y $PiSj-WCH$ (4 casos). Cada una de las etapas del proceso de biorrefinería se describe a continuación.

3.1 Proceso de condicionamiento

El objetivo principal de esta sección es reducir el tamaño de la materia prima lignocelulósica, para que pueda hidrolizarse adecuadamente (Sánchez et al., 2013). El diagrama de flujo del proceso se presenta en la Figura 5. El proceso comienza con la trituración de la materia prima en una trituradora (SR-101), luego se tamiza finamente en una criba vibratoria (VS -101). Las partículas finas (que contienen aproximadamente un 65% de cenizas y un 35% de polisacáridos) se consideran residuos sólidos, que se envían a la sección de cogeneración o se descartan (según la configuración del diseño). Luego, las partículas se criban en una segunda criba vibratoria (VS-102), filtrando las de tamaño adecuado para enviarlas a la sección de pretratamiento. Mientras que las partículas sin tamaño se reciclan a la trituradora mediante un transportador neumático (PC-101).

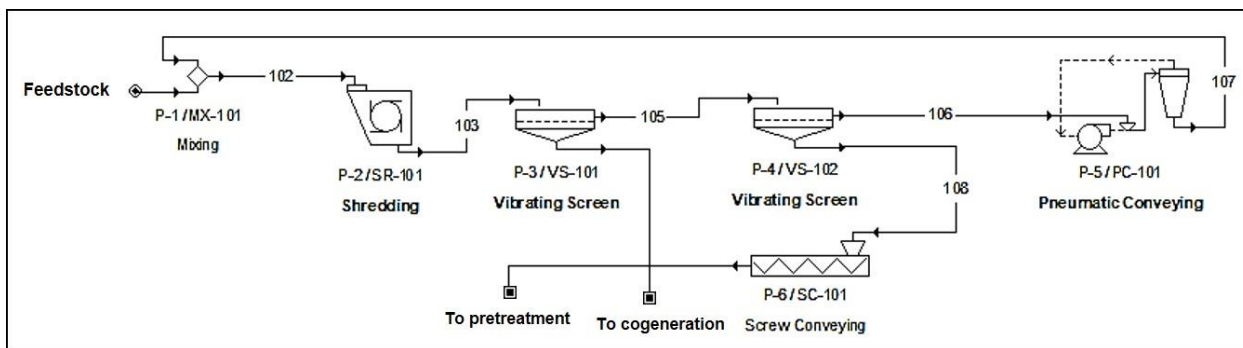


Figura 5. Diagrama de flujo para el acondicionamiento de la materia prima.

3.2 Proceso de pretratamiento

En este trabajo se han seleccionado los dos pretratamientos más eficientes reportados en la literatura para el bioetanol 2G (Girio et al., 2010), y también empleados industrialmente (ver Tabla 1): explosión de vapor y pretratamiento con ácido diluido.

3.2.1 Pretratamiento con ácido diluido

El pretratamiento con ácido diluido (P1) es un pretratamiento químico y su diagrama de flujo del proceso se presenta en la Figura 6. El ácido sulfúrico diluido (0.75%) se ajusta (en P-13) y se agrega al proceso. La corriente de ácido diluido (203) se divide en una fracción que se mezcla con la corriente del acondicionamiento para realizar un remojo y otra se envía directamente al reactor de pretratamiento. La corriente (206) con la materia prima remojada previamente se calienta de 25 a 90 °C y es transportada al tanque de mezcla (BV-201). Posteriormente, la corriente (HX-202) se calienta a 190 °C y es ingresada en el reactor de pretratamiento (RX-201), en el que también se agrega la fracción restante de ácido diluido. Los azúcares de hemicelulosa y otros compuestos se liberan debido a la hidrólisis ocurrida de acuerdo con las reacciones y condiciones de operación dadas en la Tabla 2. Algunos compuestos tóxicos generados por el pretratamiento se reducen por neutralización, por lo que la suspensión de hidrolizado se enfría (HX-204) y se filtra por medio un filtrado rotatorio al vacío (RVF-201). La torta de filtración se transporta a un tanque de almacenamiento (V-202). Mientras se neutraliza el filtrado en un reactor (RX-202) con hidróxido de calcio, posteriormente se enfría (HX-205) de 90 a 30 °C, y luego se introduce en el reactor de reacidificación (RX-203) para ajustar pH. En este último, el ácido sulfúrico reacciona con el

hidróxido de calcio y se forma yeso (ver Tabla 2). El caldo que sale del reactor de reacidificación se separa con un filtro rotatorio (RVF-202), de manera que se retira el yeso del proceso, mientras que el filtrado (corriente de hidrolizado) se transporta al tanque de almacenamiento (V-202), para posteriormente enviar la corriente a la etapa de SSCF.

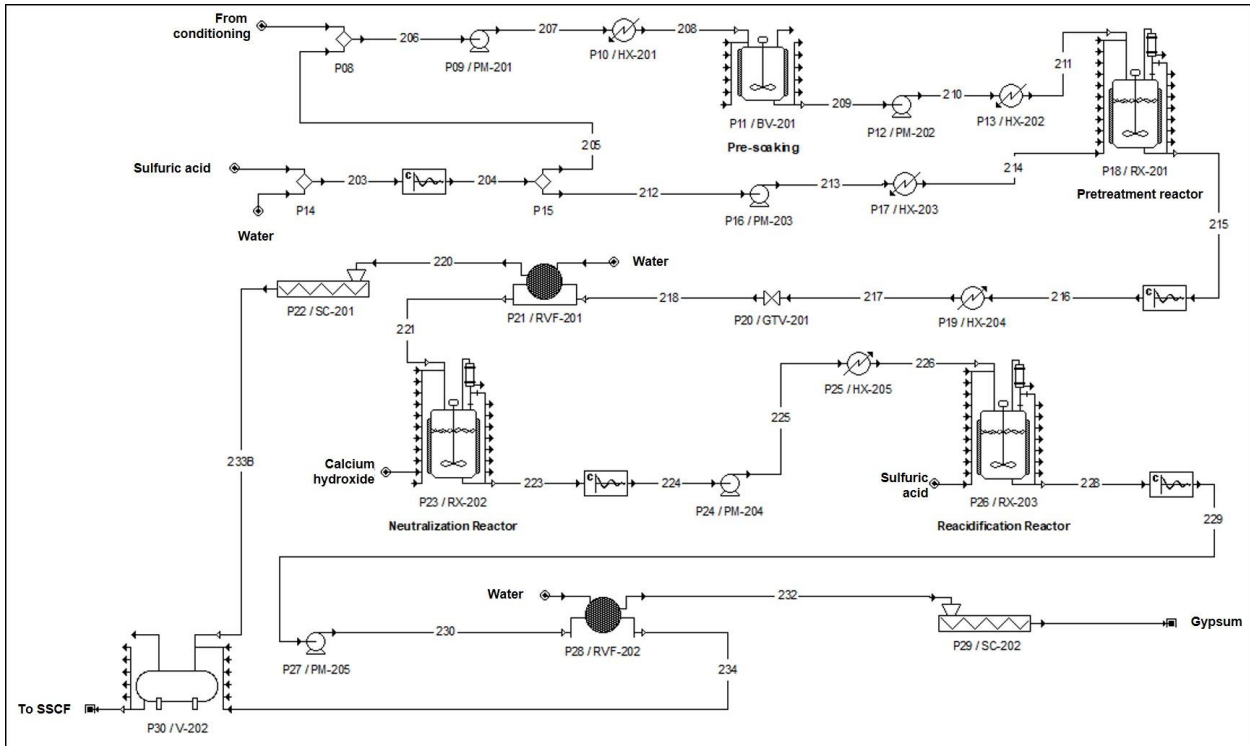


Figura 6. Diagrama de flujo para el pretratamiento con ácido diluido (P1).

3.2.2 Pretratamiento por explosión de vapor

El pretratamiento por explosión de vapor (P2) es un pretratamiento fisicoquímico, cuyo diagrama de flujo del proceso se muestra en la Figura 7. La corriente proveniente del acondicionamiento se hidrata primero en un tanque de mezclado (BV-201), luego se calienta a 180 °C (HX-201) y posteriormente se transporta al reactor de pretratamiento (PFR-201). El pretratamiento por explosión de vapor se simuló como un reactor en el que se realiza la hidrólisis térmica utilizando vapor a alta presión. Las reacciones y condiciones de operación se dan en la Tabla 2. La suspensión de hidrolizado se expande adiabáticamente a presión atmosférica en un tanque flash (FL-201). Finalmente, la suspensión de hidrolizado se almacena en un tanque

horizontal (V-202), para enviar posteriormente el tren a la etapa SSCF. Una ventaja de este pretratamiento es que no se requiere un paso de neutralización.

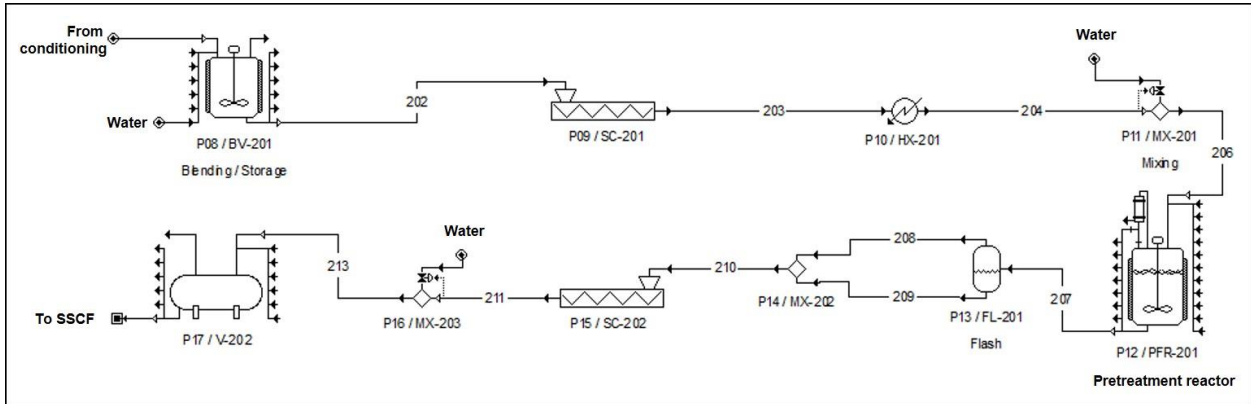


Figura 7. Diagrama de flujo de la etapa de pretratamiento por explosión de vapor.

3.3 Sacarificación y co-fermentación simultánea (SCFS)

Después del pretratamiento, comienza la etapa SSCF, que es el núcleo de la biorrefinería. Se ha seleccionado SSCF porque es el proceso más intensificado con tecnología madura para el procesamiento industrial, ya que la CBP es todavía una tecnología en desarrollo. La Figura 8 muestra el diagrama de flujo del proceso correspondiente.

Primero, la corriente se enfría (HX-301) de 77 a 30 ° C. Luego se agregan enzimas (0.2%) (MX-301). Posteriormente, se lleva a cabo el SSCF en el reactor (RX-301), donde se produce la sacarificación (hidrólisis de celulosa mediante enzimas celulasas) y la co-fermentación (fermentación de azúcares C5 y C6 mediante *Z. mobilis* recombinantes) para la producción de bioetanol. Las reacciones y condiciones de operación se pueden encontrar en la Tabla 2. Finalmente, el caldo de fermentación, que contiene alrededor de 5.5% (p/p) de etanol, se transporta a un tanque de almacenamiento (V-301), que será enviado a la sección de recuperación de etanol.

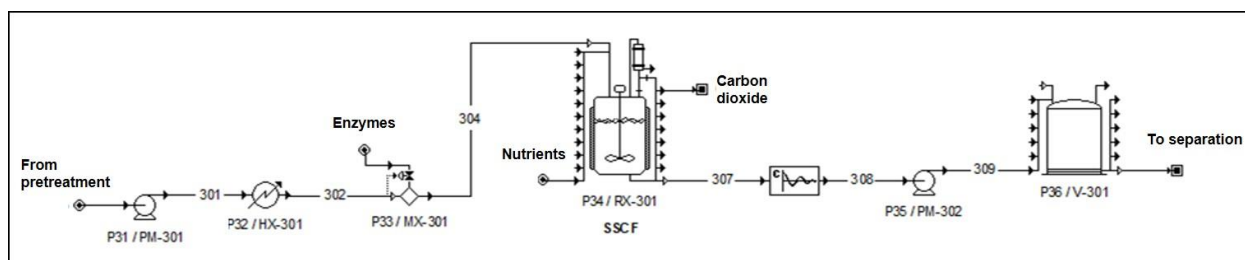


Figura 8. Diagrama de flujo de la etapa de SSCF.

Tabla 2. Reacciones y conversiones para la producción de etanol.

Sección Reacciones	Conversión (%)	Condiciones de operación T (°C), P (bar)	Equipo ID
Pretratamiento			
$Celulosa + H_2O \rightarrow Glucosa$	8 (P1) ^a	190, 15 (P1) ^a	RX-201
	9 (P2) ^b	200, 10 (P2) ^b	
$Hemicelulosa + H_2O \rightarrow Xilosa$	83.7 (P1) ^a	190, 15 (P1) ^a	RX-201
	83.6 (P2) ^b	200, 10 (P2) ^b	
Neutralización			
$H_2SO_4 + CaH_2O_2 \rightarrow CaSO_4 + 2H_2O$ (Neutralización)	100 (P1) ^a	90, 1.013 ^a	RX-202
$H_2SO_4 + CaH_2O_2 \rightarrow CaSO_4 + 2H_2O$ (Ajuste de pH)	100 (P1) ^a	30, 1.013 ^a	RX-203
Saccharification			
$Celulosa + H_2O \rightarrow Glucosa$	80 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
Co-Fermentación			
$Glucosa \rightarrow 2CO_2 + 2Etanol$	92 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
$Glucosa + 0.05CSL + 0.02DAP \rightarrow 6Z.mobilis + 2.4H_2O$	2.7 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
$Glucosa \rightarrow 3Ácido acético$	2.2 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
$3Xilosa \rightarrow 5CO_2 + 5Etanol$	85 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
$Xilosa + 0.04CSL + 0.01DAP \rightarrow 2H_2O + 2Z.mobilis$	2.9 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301
$2Xilosa \rightarrow 5Ácido acético$	2.4 ^c	41, 1.013 ^c	RX-301

CSL = Licor de maíz, DAP = Fosfato diamónico.

Referencias: ^a Aden et al. (2002), ^b Wang et al. (2013), ^c Wooley et al. (1999).

3.4 Proceso de separación y purificación

La recuperación del etanol consta de dos pasos: primero, se utilizan dos columnas de destilación convencionales para concentrar el caldo de fermentación cerca del punto azeotrópico, y luego un proceso de deshidratación (adsorción con tamices moleculares o destilación extractiva) para obtener el etanol anhidro.

Las dos columnas convencionales se modelaron utilizando NRTL como modelo termodinámico para el equilibrio vapor-líquido, y teniendo en cuenta los parámetros de diseño del proceso dados en la Tabla 3. El diagrama de flujo del proceso correspondiente se muestra en la Figura 9 y Figura 10. En consecuencia, la corriente de la etapa SSCF se calienta primero a 95 ° C y luego se alimenta a la primera columna de destilación (CD-401). El fondo se enfría a 25 ° C y luego se separa mediante filtración rotatoria al vacío (RVF-401). La torta es enviada a la etapa de cogeneración y el filtrado se transporta al tratamiento de aguas residuales. La corriente de destilado, que contiene aproximadamente 40% (p / p) de etanol, alimenta la segunda columna (rectificadora) (CD-402), que opera a 1.013 bar con 40 etapas. La corriente de destilado, que también se le conoce como corriente rectificada, la cual contiene aproximadamente un 90% (p/p) de etanol, se envía al proceso de deshidratación (adsorción con tamices moleculares o destilación extractiva); mientras que el fondo se envía a tratamiento de aguas residuales.

Tabla 3. Parámetros de diseño para los procesos de separación.

Parámetro	Columna de concentración (CD-401)	Columna de rectificación (CD-402)	Columnas de adsorción (MS-401)	Columna de destilación extractiva (CD-403)	Columna de recuperación del solvente (CD-404)
P (bar)	1.89	1.72	3.45 (adsorción), 0.30 (regeneración)	1.013	0.20
$T_{alim.}$ (°C)	95	78	150	78	99
Número de etps.	32	40	-	18	11
Etp. de alim.	20	26	-	12	6
Etp. alim. del solv.	-	-	-	3	-
Rel. de reflujo	3	3.2	-	0.35	0.25
Q_C (MW)	-28.4	-8.7	-3.91	-6.3	-0.23
Q_R (MW)	25.8	9.2	4.37	6.3	0.8
Compresor (MW)	-	-	0.08	-	-

3.4.1 Adsorción con tamices moleculares

El diagrama de flujo del proceso para la separación 1 (S1) por adsorción con tamices moleculares se muestra en la Figura 9. Esta tecnología de deshidratación utiliza un lecho de zeolita en el que las moléculas de agua se retienen fuertemente dentro de los poros, mientras que las moléculas de etanol pasan a través del lecho. Porque las moléculas de agua tienen un diámetro de 2.8 Å y los poros son de 3 Å, mientras que las moléculas de etanol son más grandes con un diámetro de 4.4 Å. El proceso consiste en ciclos combinados de deshidratación de etanol a 3.45 bar y regeneración del tamiz molecular a 0.30 bar. El modelo de este proceso de separación se basa en el estudio reportado por Ebrahimiaqda & Ogden (2017), donde el diseño de las columnas de adsorción se desarrolla utilizando balances de masa y energía asumiendo la fase gaseosa como ideal, se aplicó el modelo NRTL para equilibrio líquido-vapor, dispersión axial y radial despreciable, velocidad constante del fluido, proceso adiabático, flujo pistón isotérmico para adsorción y desorción, y sin adsorción de etanol en tamices moleculares. Los parámetros de diseño del proceso se dan en la Tabla 3. El diagrama de flujo del proceso para esta separación S1 se muestra en la Figura 9.

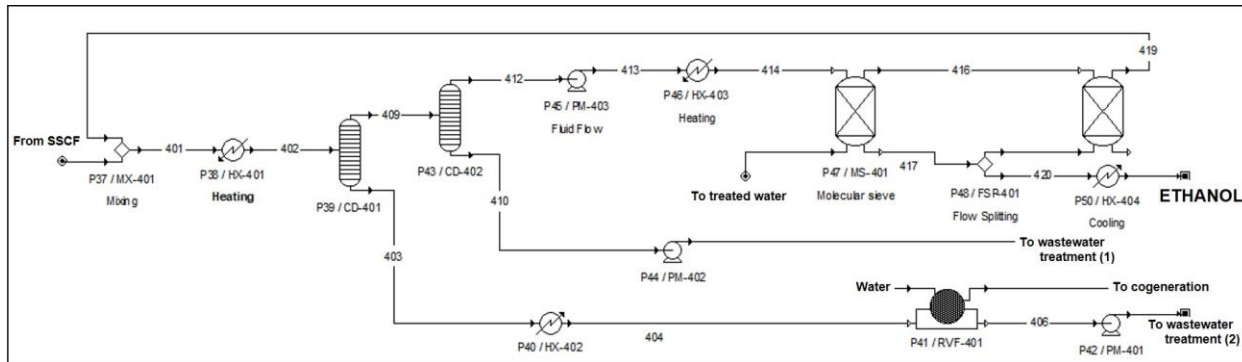


Figura 9. Diagrama de flujo del proceso para la separación 1 (S1) mediante adsorción con tamices moleculares.

Siguiendo la Figura 9, el destilado de la columna rectificadora (CD-402) se calienta (HX-403) a 150 ° C y luego se deshidrata en fase de vapor en una de las dos columnas de adsorción (MS-401). La corriente principal alcanza una pureza de etanol del 99.95% (p/p), que se enfría (HX-404). Mientras que una columna adsorbe agua, la otra se regenera añadiendo vapor de etanol puro

(aproximadamente el 15% de la corriente principal de etanol) a través del lecho cargado aplicando vacío. El agua se elimina del adsorbente y se almacena con el agua tratada; mientras que la mezcla de etanol-agua se recicla a la corriente de alimentación del proceso de separación.

3.4.2 Destilación extractiva

En esta tecnología, la adición de un agente de arrastre altera las volatilidades relativas de los componentes en la mezcla azeotrópica de etanol-agua, haciendo posible la separación entre los componentes. Gil y col. (2014) informaron que los solventes (como los glicoles), las sales inorgánicas (como CaCl_2 , AlCl_3 , KNO_3) o la combinación de un solvente con una sal se pueden usar como agentes de arrastre. Además, también se pueden usar líquidos iónicos como agente de separación. Para el caso particular de la deshidratación del etanol, se ha demostrado que el etilenglicol y el glicerol son industrialmente eficaces para la destilación extractiva. Además, se sabe que el bioglicerol es un subproducto de las biorrefinerías de biodiésel, que podría considerarse con potencial para el acoplamiento de biorrefinerías (Nhien et al., 2017). Entonces en este trabajo se considera la destilación extractiva con glicerol. El diagrama de flujo del proceso correspondiente para la separación S2 se muestra en la Figura 10. Los parámetros de diseño del proceso se dan en la Tabla 3.

Siguiendo la Figura 10, el destilado de la columna rectificadora (CD-402) se alimenta a la columna de destilación extractiva (CD-403), así como a la corriente de solvente y el solvente reciclado de la columna de recuperación de solvente (CD-404). La corriente de salida principal de la columna de extracción (CD-403), que contiene etanol al 99.95%, se alimenta a un condensador a 80 °C y finalmente la corriente se enfría (HX-404) a 25 °C para su almacenamiento. El fondo está compuesto por una mezcla de agua-glicerol, que se separa en una columna de recuperación (CD-404), donde el agua de la parte superior se recircula al proceso y el glicerol del fondo se recircula a la columna de destilación extractiva.

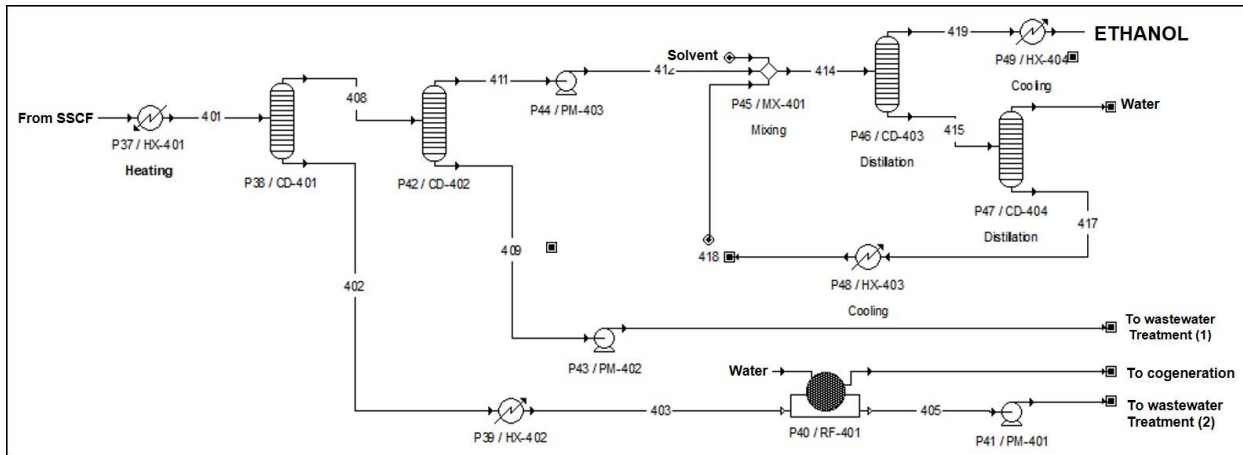


Figura 10. Diagrama de flujo del proceso para la separación 2 (S2) mediante destilación extractiva.

3.5 Proceso de cogeneración de electricidad

La cogeneración y el tratamiento de aguas residuales forman parte del proceso de intensificación para disminuir los residuos líquidos y sólidos, dándoles un valor agregado. El diagrama de flujo del proceso se muestra en la Figura 11.

La etapa de cogeneración recibe los residuos sólidos de acondicionamiento, separación y tratamiento de aguas residuales. Primero, los residuos sólidos se precalientan mediante intercambio de calor (HX-501), la corriente sólida se transporta a la caldera (SG-501) y otras dos corrientes alimentan la caldera con agua para vapor y aire para promover la combustión. La caldera tiene tres corrientes de salida: la corriente de gas de combustión que contiene un 25% de agua, por lo que se condensa y recircula al proceso; la corriente de cenizas que son residuos del proceso y la corriente de vapor que alimenta un generador de turbina de vapor (SE-501). Los subproductos de esta etapa del proceso son vapor, agua condensada y electricidad, que se reutilizan en la biorrefinería.

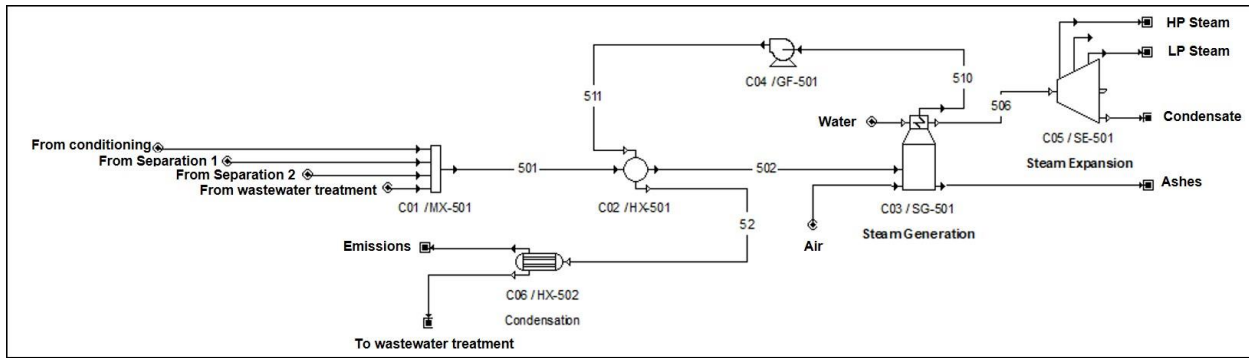


Figura 11. Diagrama de flujo de proceso para cogeneración (C)

3.6 Tratamiento de aguas residuales

El objetivo principal de un proceso de tratamiento de aguas residuales es disminuir el impacto ambiental mediante la eliminación de contaminantes en las aguas residuales. Entonces, primero, la decisión de implementar una planta de tratamiento de aguas residuales depende de la calidad del agua. Para ello, los parámetros más recomendados en el análisis de aguas residuales para usos industriales son: carbono orgánico total (*Total Organic Carbon*, TOC), demanda química de oxígeno (*Chemical Oxygen Demand*, COD) y demanda bioquímica de oxígeno (*Biochemical oxygen demand*, BOD) (Chapman & Kimstach, 1996). Una vez que se garantiza la calidad del agua, el tratamiento de aguas residuales tiene el potencial de proporcionar agua tratada en el proceso y reducir el consumo de agua dulce de la biorrefinería, de modo que este proceso puede reciclar alrededor del 80% del agua total de proceso requerida.

Se implementa un diseño convencional para el tratamiento de aguas residuales como se muestra en el diagrama de flujo del proceso en la Figura 12. Las aguas residuales alimentan al tanque de ecualización (SV-601) para proporcionar un flujo influente homogéneo al proceso aguas abajo. A continuación, la corriente de aguas residuales es tratada por digestión anaeróbica (RX-601), la corriente de biogás producida en la digestión anaeróbica tiene un alto contenido de metano, por lo que se envía al proceso de cogeneración para la recuperación de calor (Wooley et al., 1999). Posteriormente, la corriente se trata en el reactor aeróbico (RX-602), y su efluente alimenta al clarificador (CL-601) donde se separan líquidos y sólidos. Una fracción de la corriente de sólidos

se recicla al reactor aeróbico, mientras que el resto se filtra (FR-601) para eliminar la mayor parte del agua. La torta de filtración (lodos) se envía a la etapa de cogeneración y el líquido filtrado se recircula al reactor aerobio. El agua del clarificador (agua tratada) se almacena en un tanque (V-602) y se recircula al proceso.

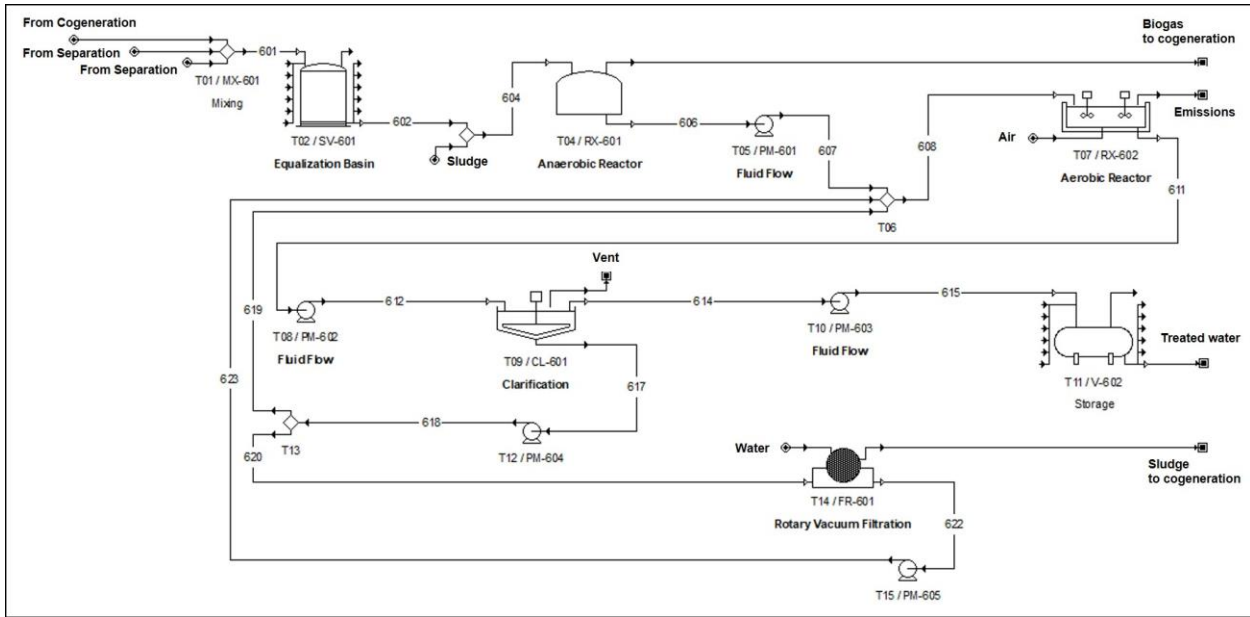


Figura 12. Diagrama de flujo de proceso para el tratamiento de aguas residuales (W).

4 ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Para fines de simulación, las configuraciones de biorrefinería 2G se diseñaron para procesar 330,000 toneladas por año de materia prima (asumiendo un nivel de humedad del 7%), equivalente a 306,900 toneladas por año de bagazo de caña de azúcar en base seca. La capacidad instalada anual alcanza alrededor de 120 millones de litros de etanol anhidro, que se acerca al valor más alto reportado para las plantas industriales que se muestran en la Tabla 1. Se consideró un tiempo de operación anual de la planta de 330 días por año. El modelado de biorrefinerías, la resolución de balances de masa y energía y el diseño del proceso se realizaron en SuperPro Designer® v.10 (un simulador de proceso modular comercial), que incluye una extensa base de datos para propiedades de componentes, modelos de operaciones unitarias, modelos cinéticos y termodinámicos, así como los costos operativos y algunos métodos de análisis de rentabilidad. En particular, se utilizó NRTL como modelo termodinámico para VLE (equilibrio vapor-líquido). Para densidades de mezcla, se consideró la aditividad de volumen junto con los coeficientes de contribución volumétrica (λ_i), considerando $\lambda_i \leq 1$ para componentes líquidos, $\lambda_i \leq 0.1$ para componentes sólidos que se disuelven completamente en una mezcla solvente, y $0.2 \leq \lambda_i \leq 0.3$ para componentes sólidos que forman una suspensión con disolventes. Además, algunos detalles de la simulación de la biorrefinería de etanol 2G se dan en los Apéndices, tales como: un resumen del diseño del equipo (ver Tablas A.1, A.2 y A.3 en Apéndice A), e información de los principales flujos de proceso (ver Tabla A.4 en Apéndice A).

Para el análisis de integración de calor, el requisito mínimo de energía se determina calculando el uso mínimo de los servicios de calefacción y refrigeración cuando el calor se intercambia entre las corrientes fría y caliente del proceso de biorrefinería en general. Para ello, se utiliza el método gráfico mediante curvas compuestas de calentamiento y enfriamiento (Seider et al., 2016). Por lo tanto, primero se identifican las corrientes fría y caliente (ver Tabla A.5 en Apéndice A), luego las curvas compuestas caliente y fría se forman mediante las trayectorias temperatura-entalpía. La curva compuesta caliente representa la disponibilidad de entalpía de todas

las corrientes calientes, y la curva compuesta fría representa la demanda de entalpía de todas las corrientes frías en el proceso. Ambas curvas compuestas se muestran en la Figura 13, las cuales están alineadas para asegurar la temperatura de intercambio mínima requerida, $\Delta T_{\min} = 10^{\circ}\text{C}$. Posteriormente, las cantidades mínimas de tareas de calefacción y refrigeración de servicios públicos, y el punto de pellizco, se determinan directamente a partir del diagrama de curva compuesto (según la Figura 13). Finalmente, habiendo determinado las utilidades mínimas para calefacción y refrigeración, estos resultados se integran en el cálculo de los servicios totales de calefacción y refrigeración y sus respectivos costos para la biorrefinería.

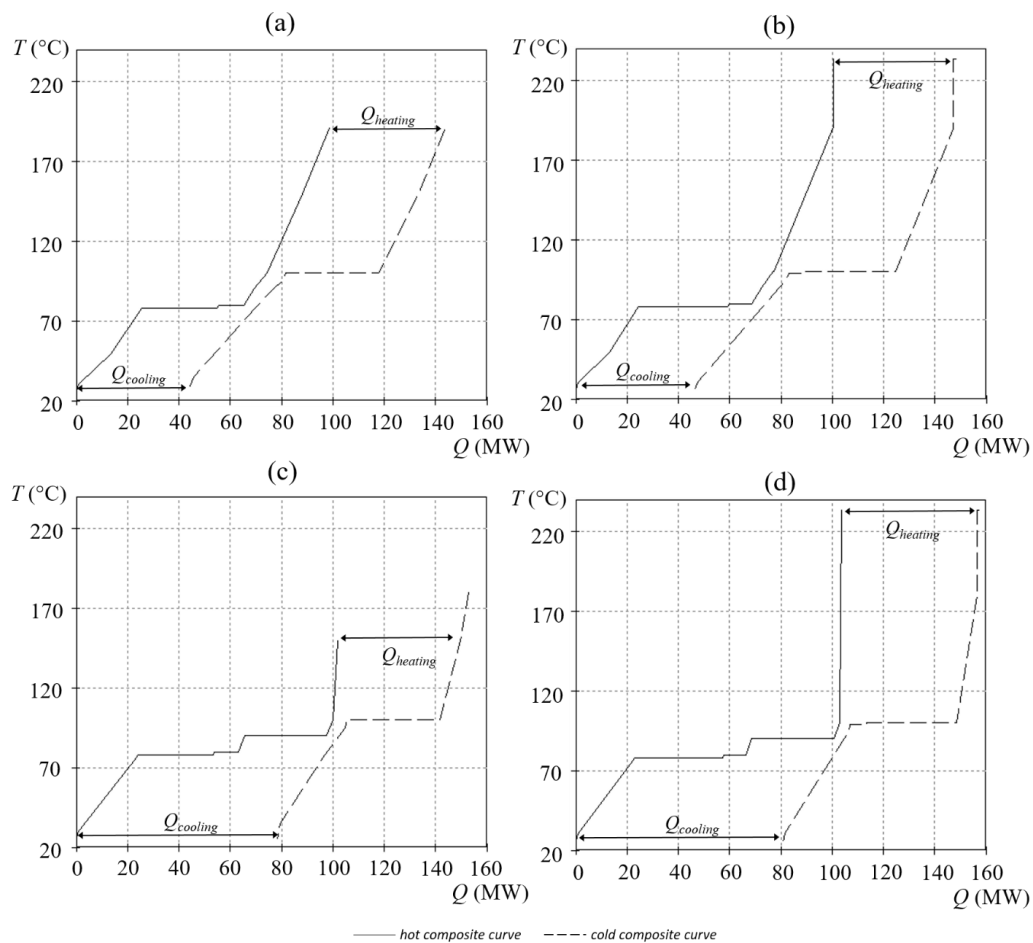


Figura 13. Diagramas de curvas compuestas para el análisis de integración de calor de las configuraciones intensificadas: (a) P1S1-WC, (b) P1S2-WC, (c) P2S1-WC, (d) P2S2-WC.

Para evaluar los indicadores de intensificación de las biorrefinerías, se calculó el CUP (Y_1 , Ec. (6)) utilizando el método $VPN = 0$ (como se describe en la sección 2.2.1). Dado que este método no está incluido en SuperPro Designer®, luego se implementó y resolvió en hojas de cálculo de MS Excel. El rendimiento del consumo de energía (Y_2 , Ec. (7)) se calculó a partir de los balances de masa y energía, teniendo en cuenta la integración energética a través del análisis Pinch realizado en el software Hint v. 2.2. Mientras que el rendimiento de residuos (Y_3 , Ec. (8)) se calculó directamente a partir de los balances de masa y energía.

4.1 Evaluación de costos

Los parámetros de evaluación económica utilizados para el método VPN se establecieron en dólares estadounidenses, la vida de la planta (n) de 15 años, una tasa de rendimiento (i) del 4%, un 30% de préstamo sobre la inversión total, un préstamo con tasa de interés del 6% y un período de depreciación de 12 años. Los costos de la materia prima fueron: \$0.015/kg de bagazo de caña de azúcar, \$3/kg de enzima, \$0.036/kg de ácido sulfúrico, \$0.15/kg de hidróxido de calcio, \$0.16/kg DAP, \$0.18/kg CSL, \$0.0002/kg de agua de proceso. Mientras que los costos de servicios auxiliares utilizados fueron \$0.012/kg de vapor, \$0.02/kg vapor de alta presión (VAP), \$0.0001/kg de agua de refrigeración y \$0.1/kW-h para electricidad. Mientras que los costos de los equipos se obtuvieron de la base de datos de SuperPro Designer.

Los resultados del CUP se muestran en la Figura 14, donde se presentan las 24 configuraciones evaluadas. El primer resultado relevante observado es que los mejores casos con menores costos fueron las configuraciones intensificadas P2S1-WCH y P2S2-WCH con un CUP de \$0.43/L y \$0.44/L de etanol, respectivamente. Mientras que las configuraciones P1S1 y P1S2 (es decir, sin intensificación) fueron las menos rentables con un CUP de \$0.95/L y \$0.96/L de etanol, respectivamente; lo que significa que con las configuraciones intensificadas fue posible reducir el CUP en aproximadamente un 55%. Estos resultados también ayudan a concluir que el pretratamiento P2 (con explosión de vapor) es más rentable que el pretratamiento P1 (con ácido diluido). En la misma figura se presenta la aportación de cada uno de los conceptos incluidos en el cálculo de la CUP, destacando que el coste energético por servicios auxiliares y el coste de gestión de residuos son los de mayor impacto con respecto al grado de intensificación. Es decir, el

impacto por coste energético disminuye y las emisiones prácticamente se eliminan, aumentando el grado de intensificación (es decir, todas las configuraciones *PiSj*-WCH).

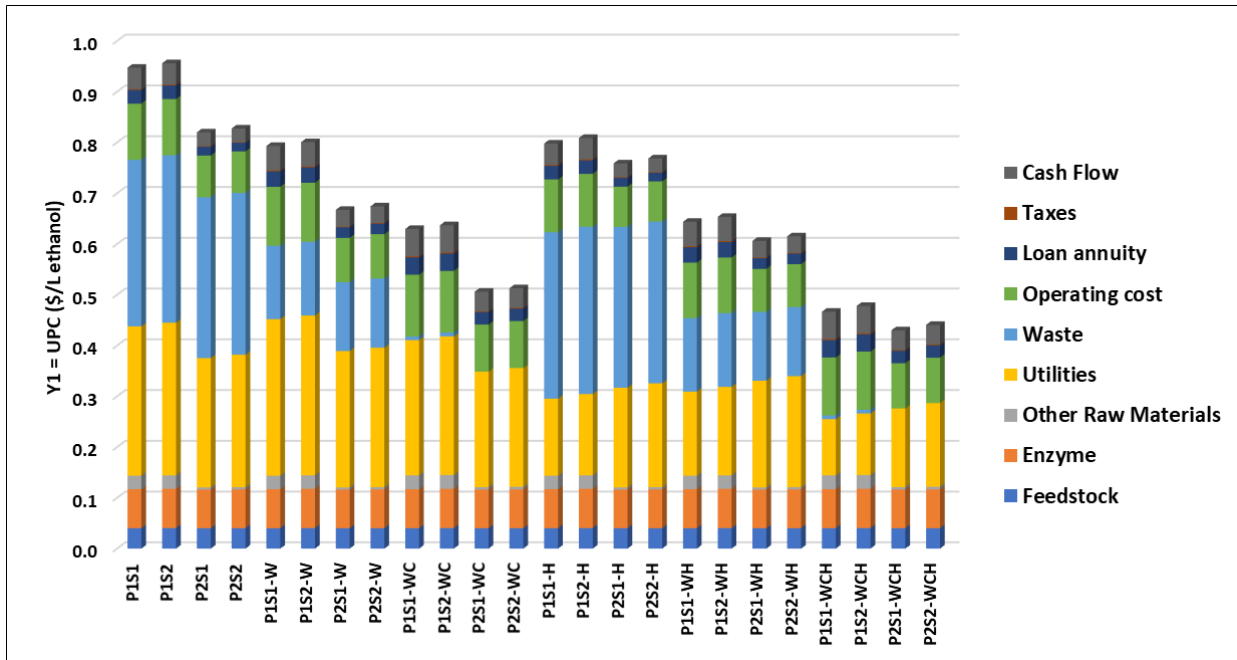


Figura 14. Evaluación del costo unitario de producción (Y_1)

4.2 Evaluación de energía

La Figura 15 muestra los resultados de la evaluación del rendimiento del consumo de energía (Y_2), teniendo en cuenta que a menor Y_2 , menor consumo de energía y mayor eficiencia energética. Primero, al analizar las configuraciones intensificadas con la integración de agua tratada, *PiSj*-W, se obtiene que estas configuraciones presentan en promedio un 1.8% más de Y_2 en comparación con sus casos base (es decir, *PiSj*). Este mayor consumo energético se atribuye a la incorporación del proceso de tratamiento de aguas residuales. En segundo lugar, los diseños *PiSj*-WC mostraron en promedio un Y_2 2.4% menor en comparación con los casos base *PiSj*, lo que significa que la incorporación tanto del tratamiento de aguas residuales como de la cogeneración favorece la integración de la energía. En tercer lugar, todas las configuraciones con integración energética fueron las que presentaron una mejora considerable, alcanzando aproximadamente un 40%, en promedio, menos que el consumo de energía en comparación con sus configuraciones base, *PiSj*. Y finalmente, comparando las 4 configuraciones más intensificadas, *PiSj*-WCH, los diseños con

pretratamiento P1 presentan un Y_2 de 33%, en promedio, menor que los diseños con pretratamiento P2, esto porque, a pesar de que el pretratamiento P1 usa más equipos (ver listado de equipos en las Tablas A.1 en el Apéndice A), fue posible obtener una mayor integración del calor con sus corrientes frías y calientes. Según los resultados globales, las mejores configuraciones (es decir, con el Y_2 más bajo) fueron P1S1-WCH y P1S2-WCH con 5.12 y 5.60 kW/L de etanol, respectivamente.

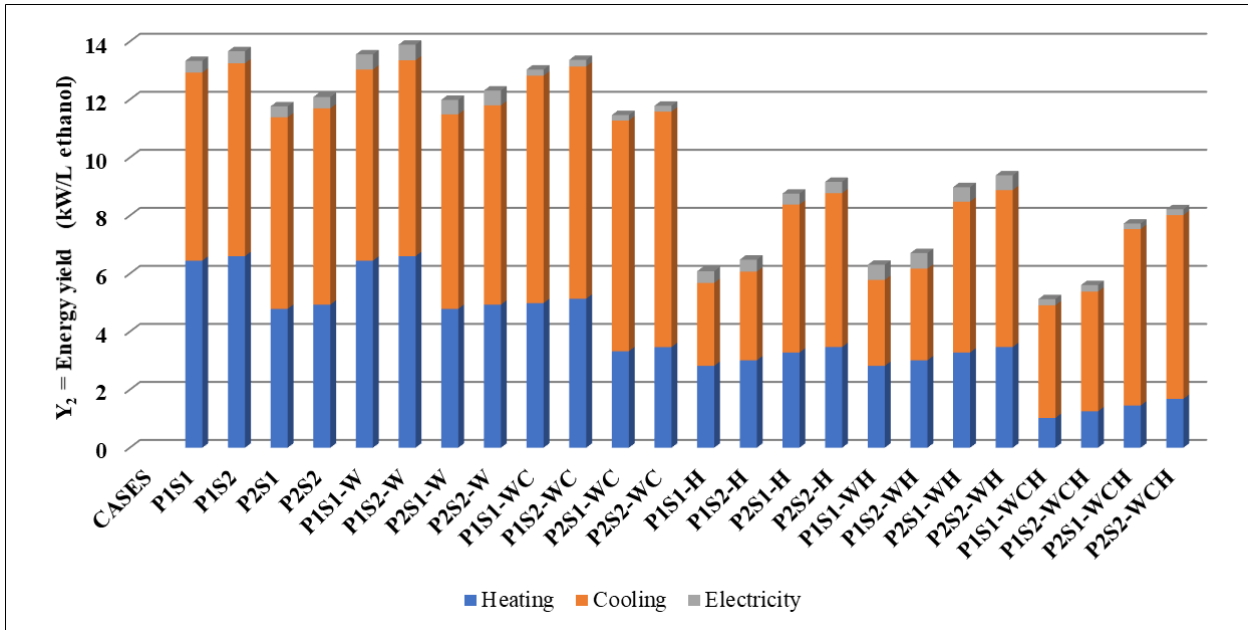


Figura 15. Evaluación del rendimiento de consumo de energía (Y_2)

Se calculó la contribución Y_2 de cada una de las etapas del proceso para los diseños PS, PS-W y PS-WC, sin incluir diseños con integración de calor, para comprender la distribución del consumo de energía en la biorrefinería. En la Figura 16 se muestran los resultados obtenidos, donde se observa que la etapa de purificación es la que demanda más recursos energéticos, seguida de la etapa de pretratamiento. Este resultado coincide con lo reportado en la literatura, por lo que se ha dedicado más I&D a las etapas de pretratamiento y separación. En particular, se puede ver que el pretratamiento P2 (con explosión de vapor) tiene un consumo de energía, en promedio, 30% menor en comparación con P1 (con ácido diluido). En cuanto a la etapa de purificación, la separación S1 (con tamices moleculares) tiene un consumo de energía de 3.8% en promedio menor en comparación con S2 (con destilación extractiva).

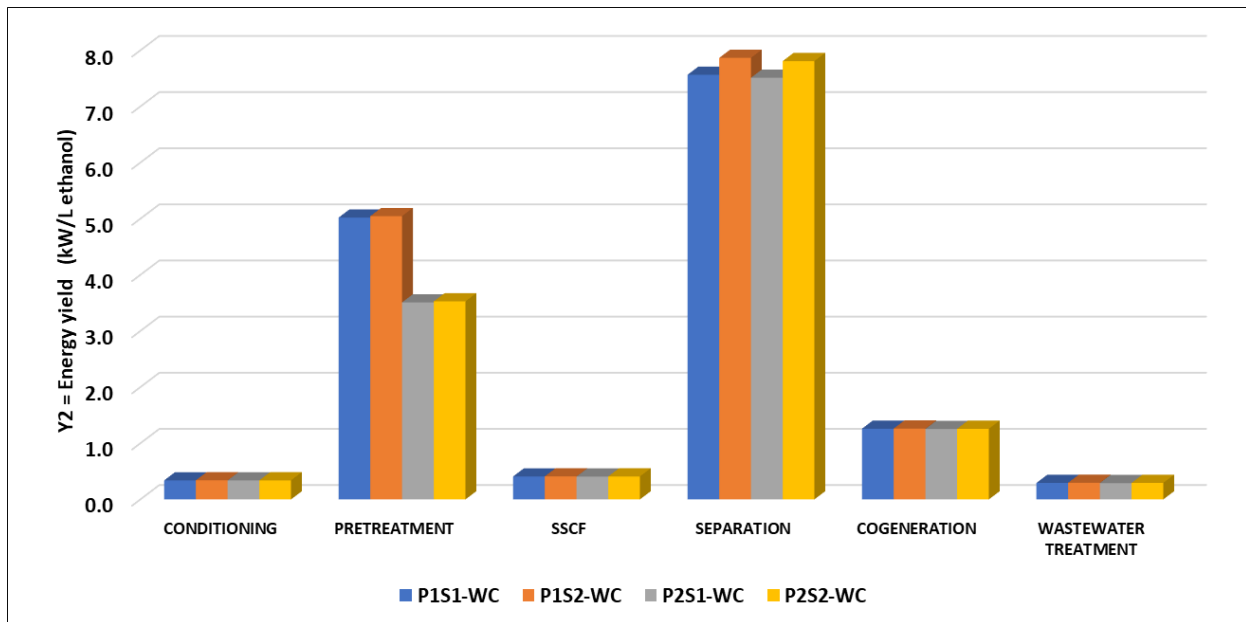


Figura 16. Evaluación del consumo de energía, dividido por etapas del proceso.

Además, la EROI se calculó de acuerdo con la Ec. (5), teniendo en cuenta que $EROI > 1$ indica un resultado favorable (lo que significa que el proceso no es un sumidero de energía), y a mayor EROI, mayor eficiencia del proceso. La Figura 17 muestra los resultados de la evaluación EROI. Como se puede observar, todas las configuraciones sin integración energética ($PiSj$, $PiSj - W$, $PiSj - WC$) presentan los valores más desfavorables y son sumideros de energía desde $EROI < 1$. Como era de esperar, se observa que todas las configuraciones con integración térmica aumentan sus valores de EROI en comparación con las configuraciones sin integración de calor. Sin embargo, a pesar de la intensificación, solo 5 configuraciones cumplieron con un $EROI > 1$: P1S1-H, P1S2-H, P1S1-WH, P1S1-WCH y P1S2-WCH. Concluyendo que los mejores casos evaluados con este indicador de energía son P1S1-WCH ($EROI = 1.26$) y P1S2-WCH ($EROI = 1.15$).

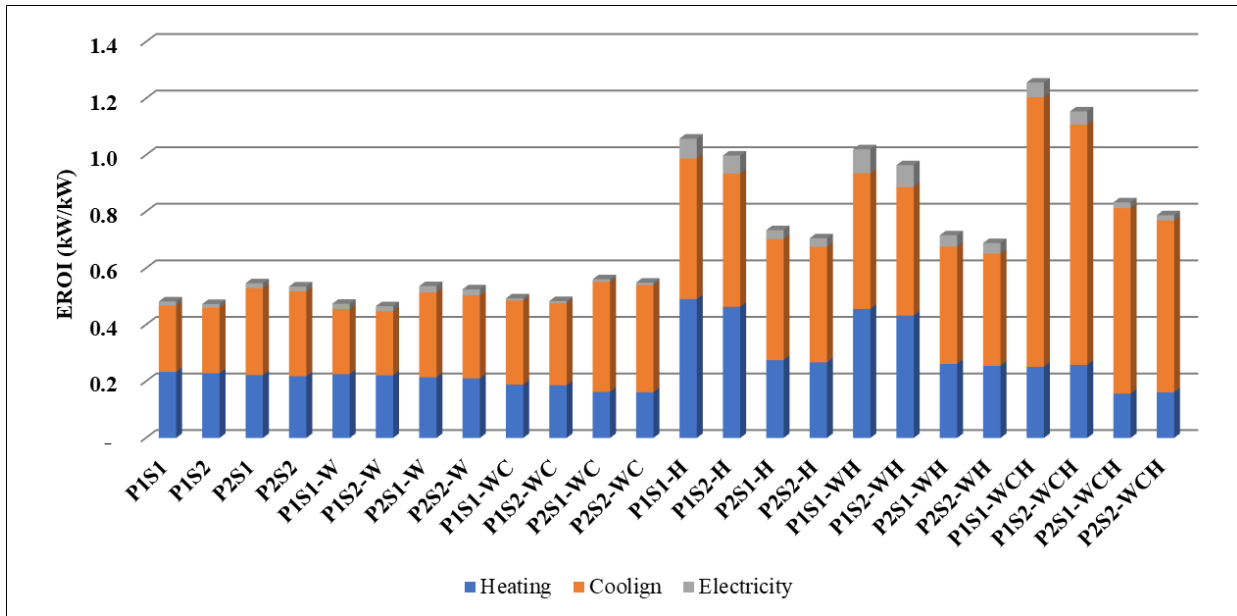


Figura 17. Evaluación del EROI.

4.3 Evaluación de residuos y emisiones

Para el indicador Y3, se calculan las emisiones de dióxido de carbono, aguas residuales y residuos sólidos por litro de etanol producido. Las evaluaciones correspondientes se muestran en la Figura 18.

Las emisiones de dióxido de carbono provienen principalmente de la combustión en la etapa de cogeneración y, en menor medida, de las reacciones ocurridas en las etapas de fermentación y tratamiento de aguas residuales. Como era de esperar, la Figura 18 muestra que todos los diseños que incorporan la etapa de cogeneración (PiSj-WC y PiSj -WC) son configuraciones con un promedio de 32% más de emisiones de CO₂ en comparación con diseños sin cogeneración (PiSj, PiSj-H, PiSj-W, PiSj -WH).

Para las aguas residuales, como se menciona en la sección 3.6, primero se verificaron los niveles de calidad del agua. La Tabla 4 presenta los parámetros de calidad (TOC, COD y BOD) para el proceso de tratamiento de aguas residuales. Según estos resultados, los afluentes contienen niveles de contaminantes, mientras que los efluentes están dentro del rango de calidad del agua industrial tratada, es decir, TOC<10 mg C/L, COD<100 mg O/L y BOD<100 mg O/L (Chapman

y Kimstach, 1996). Una vez garantizada la calidad del agua, conviene calcular Y_3 según la metodología propuesta. Como se puede observar en la Figura 18, las emisiones líquidas (aguas residuales) son las que más aportan al valor acumulado de Y_3 , principalmente en los diseños *PiSj* y *PiSj-H* que no incluyen W. Por lo tanto, al incorporar el módulo de tratamiento de aguas residuales, se logra una disminución significativa del 56.4% en promedio ya que la dependencia del agua dulce disminuye debido a la recirculación del agua tratada.

Tabla 4. Calidad del agua en el proceso de tratamiento de aguas residuales.

Parámetro	Corriente	Configuración			
		P1S1-WC	P1S2-WC	P2S1-WC	P2S2-WC
TOC (mg C/L)	Influyente	152.29	132.00	161.14	140.11
	Efluente	7.92	7.58	8.23	7.88
COD (mg O/L)	Influyente	552.00	477.36	584.08	505.10
	Efluente	28.85	27.13	29.97	28.18
BOD (mg O/L)	Influyente	496.91	428.20	525.78	453.10
	Efluente	26.00	22.36	27.00	28.08

En el caso de los residuos sólidos, se realizó una acción directa para mitigar estas emisiones con la incorporación del módulo de cogeneración energética. Como se muestra en la Figura 18, las configuraciones con cogeneración (*PiSj-WC* y *PiSj-WCH*) mostraron una eliminación de residuos sólidos de prácticamente el 100%. Cabe mencionar que el pretratamiento P1 requiere reacciones de neutralización después de la hidrólisis. Así, se produce yeso ($CaSO_4$), que no se envía a la combustión, ya que afectaría la producción de SO_x (Aden et al., 2002). Debido a esto, no fue posible eliminar el 100% de los residuos sólidos para todas las configuraciones *P1Sj-WC* y *P1Sj-WCH*. Pero, en general, existe una compensación entre intensificar con un módulo de cogeneración, ya que la reducción de residuos sólidos implica un aumento de las emisiones de CO_2 .

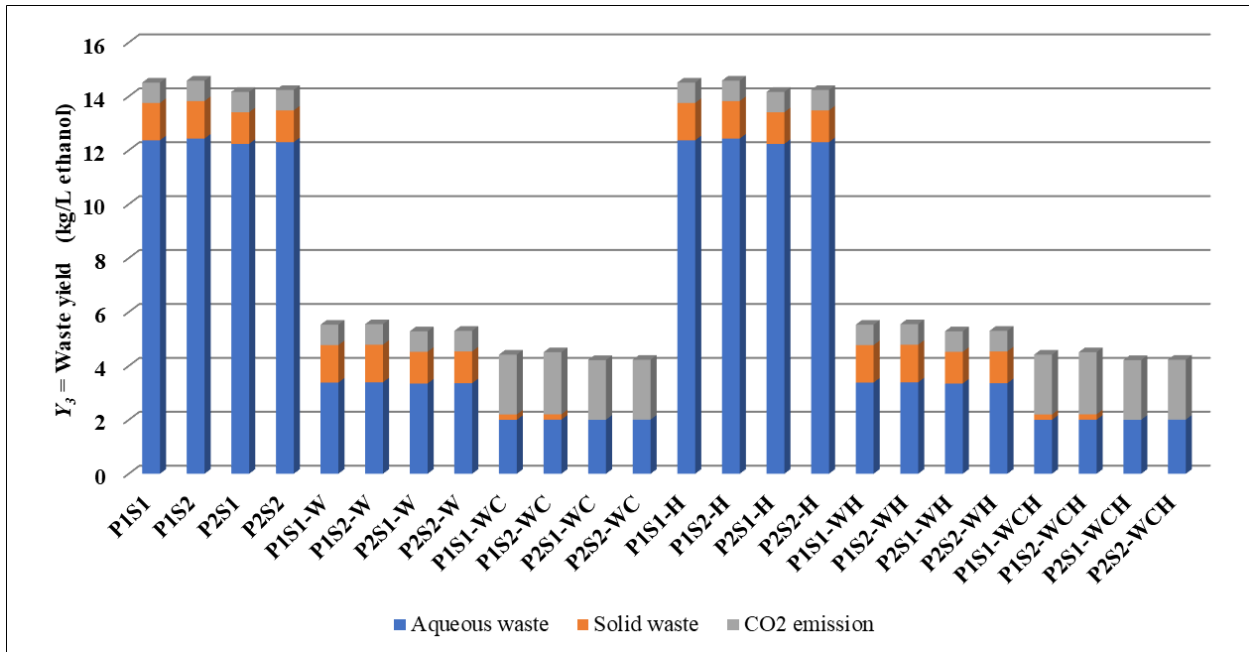


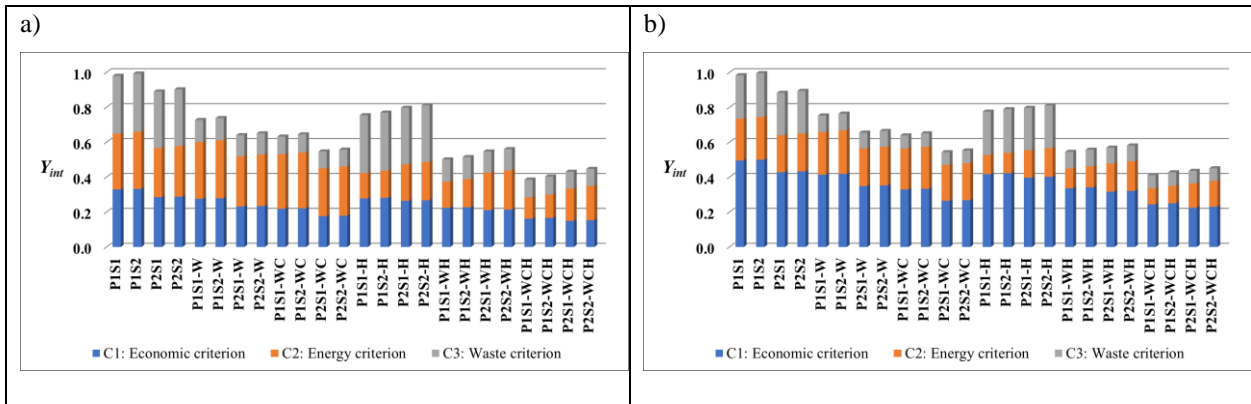
Figura 18. Evaluación del rendimiento de desechos (Y_3).

4.4 Evaluación de los criterios de intensificación de procesos

Finalmente, se evaluó el criterio de intensificación global (Y_{int}), utilizando las Ecs. (9) - (10), cuyos pesos (w_i) deben ser especificados por ingenieros e inversores según el sector industrial y la región de producción. Recordando que los valores de Y_{int} más bajos son deseables para un mejor rendimiento del proceso y una mayor intensificación; mientras que los valores de Y_{int} cercanos a 1 no son deseables, lo que significa que $Y_{int} = 1$ es el peor rendimiento de intensificación.

Con fines de simulación y para comprender el efecto de los pesos utilizados en Y_{int} , se realizó un análisis de sensibilidad para los pesos (w_1 , w_2 y w_3 se refieren a los pesos de los criterios económico, energético y de residuos, respectivamente). La Figura 19 (a) muestra los resultados cuando se asigna el mismo peso a $w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$. Como era de esperar, los cuatro valores de Y_{int} más bajos corresponden a las configuraciones más intensificadas ($PiSj$ -WCH), mientras que las configuraciones de $PiSj$ tienen los valores de Y_{int} más grandes (peores). En particular, los dos mejores casos que deberían seleccionarse como opciones de diseño fueron P1S1-WCH ($Y_{int} = 0.387$) y P1S2-WCH ($Y_{int} = 0.404$).

Posteriormente, se modificaron los valores de las ponderaciones, considerando que comúnmente se le da mayor relevancia al aspecto económico. La Figura 19 (b) muestra los resultados considerando $w_1 = 0.5$, $w_2 = w_3 = 0.25$, donde se puede observar que los valores para P1S1-WCH ($Y_{int} = 0.412$) y P1S2-WCH ($Y_{int} = 0.428$) aumentan levemente en comparación con el escenario anterior en la Figura 19 (a), aunque estos dos diseños siguen siendo los mejores. La Figura 19 (c) muestra los resultados asumiendo que $w_1 = 0.75$, $w_2 = w_3 = 0.125$, donde los mejores casos cambian a P1S1-WCH ($Y_{int} = 0.450$) y P2S1-WCH ($Y_{int} = 0,443$). Mientras que la Figura 19 (d) muestra el último escenario donde solo se considera el aspecto económico ($w_1 = 1$, $w_2 = w_3 = 0$). Se puede observar que los mejores casos ahora son P2S1-WCH ($Y_{int} = 0.450$) y P2S2-WCH ($Y_{int} = 0.461$), que son contrarios al primer escenario (Figura 19 (a)) y, por supuesto, estas configuraciones tienen la CUP más bajo (ver Figura 14). Además, conviene recordar que las configuraciones P2S1-WCH y P2S2-WCH, si bien fueron las más rentables, también fueron energéticamente ineficientes según los resultados del EROI (considerados como sumideros de energía, fueron $EROI < 1$) En conclusión, la asignación de los pesos para la evaluación Y_{int} es relevante para la toma de decisiones.



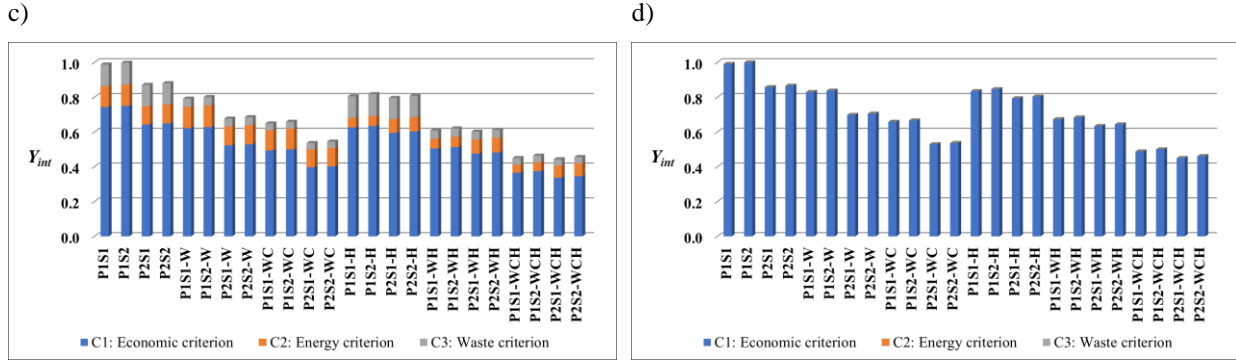


Figura 19. Evaluación de los criterios de intensificación de proceso (Y_{int}): (a) $w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$, (b) $w_1 = 0.5$, $w_2 = w_3 = 0.25$, (c) $w_1 = 0.75$, $w_2 = w_3 = 0.125$, (d) $w_1 = 1$, $w_2 = w_3 = 0$.

4.5 Biorrefinerías intensificadas

Dado que uno de los objetivos de este trabajo fue la síntesis y diseño de una biorrefinería para la producción de etanol, la Tabla 5 presenta un resumen ejecutivo para las cuatro configuraciones más intensificadas. Esta tabla informa las cantidades netas utilizadas para los diseños de biorrefinerías, así como los indicadores de desempeño. De acuerdo con los resultados de esta tabla, y en particular, considerando tanto la metodología propuesta para el criterio de intensificación global (Y_{int}) como la metodología de evaluación del EROI, los dos mejores casos coinciden para ambos enfoques. Por lo tanto, el mejor diseño intensificado con la mejor eficiencia energética es P1S1-WCH ($Y_{int} = 0.387$, $EROI = 1.26$), seguido de P1S2-WCH ($Y_{int} = 0.404$, $EROI = 1.15$).

En el Apéndice B /Tablas B1-B.5) se muestran los resúmenes ejecutivos para todos los otros casos de estudio de los diseños de la biorrefinería. Comparando dichos resultados con los resultados de la Tabla 5, se verifica que los diseños mejor intensificados fueron los casos $PiSj$ -WCH.

Tabla 5. Resumen ejecutivo de los diseños mejor intensificados

Conceptos	Valores				Unidades*
	P1S1-WCH	P1S2-WCH	P2S1-WCH	P2S2-WCH	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330.00	330.00	330.00	330.00	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	ML/año
Electricidad total req.	74.15	75.45	71.04	72.32	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	166.16	168.81	169.07	171.69	Mt/año
Vapor total req.	821.19	895.10	735.39	809.13	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	641.49	583.69	328.30	270.31	10 ³ t/año
Electricidad generada	47.84	47.69	47.82	47.67	10 ³ t/año
Vapor generado	224.65	224.02	224.56	223.94	10 ³ t/año
Vap. AP generado	99.84	99.57	99.81	99.53	10 ³ t/año
Aguas residuales	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Residuos sólidos	30.16	30.16	0.00	0.00	10 ³ t/año
CO ₂	273.33	282.13	273.29	272.94	10 ³ t/año
$Y_{int} (w_1 = w_2 = w_3 = 0.33)$	0.387	0.404	0.432	0.448	-
EROI	1.26	1.15	0.83	0.79	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.74	17.74	14.93	14.93	M\$/año
Servicios auxiliares	13.64	14.83	19.11	20.26	M\$/año
Costo de equipos	34.85	34.59	25.17	24.92	M\$
Inversión	109.16	108.37	78.85	78.05	M\$
Costo de operación anual	57.39	58.47	53.05	54.08	M\$/año
Etanol UPC	0.47	0.48	0.43	0.44	\$/L

*M se refiere a millones (10⁶)

5 CONCLUSIONES

Se ha propuesto una metodología de IP basada en cuatro aspectos de intensificación: (a) integración de operaciones unitarias, (b) integración de masa, (c) análisis de integración de calor y (d) evaluación de intensificación global. Para esto último, se definió un criterio de intensificación global (Y_{int}), incorporando la ponderación de un criterio económico, un criterio de consumo de energía y un criterio de residuos. Cabe señalar que el criterio de intensificación global puede extenderse a otras biorrefinerías o procesos industriales, para lo cual los criterios individuales deben ser seleccionados, definidos, evaluados y ponderados de acuerdo con las consideraciones establecidas en la metodología propuesta; de tal manera que se refleje una evaluación integral de la biorrefinería en estudio.

La metodología se ilustró con el análisis de 24 configuraciones de síntesis para una biorrefinería de etanol 2G, que fueron rigurosamente modeladas, simuladas y diseñadas mediante simuladores de procesos. A partir de los resultados de la simulación, se corroboró que la evaluación del criterio de intensificación global (Y_{int}) fue mejor para las cuatro configuraciones más intensificadas (es decir, $PiSj$ -WCH). Y entre estas cuatro configuraciones, se concluyó que las dos mejores soluciones intensificadas fueron en primer lugar P1S1-WCH ($Y_{int} = 0.387$, EROI = 1.26, UPC = 0.47 \$/L etanol) y en segundo lugar P1S2-WCH ($Y_{int} = 0.404$, EROI = 1.15, UPC = 0,48 \$/L etanol), cuyos UPC son inferiores al precio de venta más bajo reportado para el bioetanol 2G (0,57 \$/L etanol) por el Proyecto Raizen (Rosales-Calderón & Arantes, 2019). Otro resultado relevante, obtenido del análisis de estas dos biorrefinerías mejor intensificadas (P1S1-WCH y P1S2-WCH), fue que el pretratamiento P1 (usando ácido diluido) fue el proceso más adecuado, mientras que la separación S1 (usando adsorción con tamices moleculares) fue ligeramente mejor que S2 (usando destilación extractiva). Por lo tanto, estos resultados de simulación proporcionaron buenas comparaciones de rendimiento de diferentes opciones de procesamiento, de modo que se puedan tomar decisiones racionales entre ellas. Esto corrobora que Y_{int} se puede utilizar como indicador de evaluación del desempeño.

Si bien la metodología presentada permite comprender, analizar y evaluar cada una de las etapas principales del diseño conceptual de una biorrefinería, existen varios temas de investigación

para trabajos futuros. Se considerará el estudio de un problema multi-objetivo para la búsqueda óptima de diseños intensificados, así como el análisis de una biorrefinería 2G utilizando otras biomásas lignocelulósicas (o mezclas de ellas), y también la selección de otro *biocommodity* en su lugar o junto con bioetanol.

6 REFERENCIAS

- Aden, A., Ruth, M., Ibsen, K., Jechura, J., Neeves, K., Sheehan, J., Wallace, B., Montague, L., Slayton, A., & Lukas, J. (2002). Lignocellulosic Biomass to Ethanol Process Design and Economics Utilizing Co-Current Dilute Acid Prehydrolysis and Enzymatic Hydrolysis for Corn Stover. NREL, Golden, CO, NREL/TP-510-32438. 154. DOI: 10.2172/15001119.
- Antunes, F.A.F. Chandel, A.K., Brumano L.P., Terán Hilaes, R., Peres, G.F.D., Ayabe, L.E.S., Sorato, V.S., Santos, J.R., Santos J.C., & Da Silva, S.S. (2018). A novel process intensification strategy for second-generation ethanol production from sugarcane bagasse in fluidized bed reactor. *Renewable Energy*, 124, 189-196. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2017.06.004>
- Balan, V., Jin, M., Culbertson, A., & Uppugundla, N. (2013). The Saccharification Step: *Trichoderma Reesei* Cellulase Hyper Producer Strains. *Lignocellulose Conversion*, 65–91. doi:10.1007/978-3-642-37861-4_4
- Cai, J., He, Y., Yu, X., Banks, S., Yang, Y., Zhang, X., . . . Bridgwater, A. (2017). Review of physicochemical properties and analytical characterization of lignocellulosic biomass. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 309-322.
- Douglas J. (1988) *Conceptual Design of Chemical Processes*, Mc Graw-Hill Co.
- Gil, I. D., Uyazán, A. M., Aguilar, J. L., Rodríguez, G., & Caicedo, L. A. (2008). Separation of ethanol and water by extractive distillation with salt and solvent as entrainer: process simulation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 25(1), 207–215. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322008000100021>
- Girio, F.M., Fonseca, C., Carvalheiro, F., Duarte, L.C., Marques, S., & Bogel-Lukasik, R. (2010) Hemicelluloses for fuel ethanol: A review. *Bioresour Technol.*, 101(13), 4775-4800. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.01.088>
- Gomez LD, Steele-King CG, McQueen-Mason SJ (2008) Sustainable liquid biofuels from biomass:the writing's on the wall. *New Phytol* 178:473–485
- Grossmann, I. E., & Harjunkoski, I. (2019). *Process Systems Engineering: Academic and Industrial Perspectives. Computers & Chemical Engineering.* doi:10.1016/j.compchemeng.2019.04.028
- Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W. (2000). Research challenges in process systems engineering. *AIChE Journal*, 46(9), 1700–1703. doi:10.1002/aic.690460902
- Hernandez, C., Escamilla-Alvarado, C., Sanchez, A., Alarcon, E., Ziarelli, F., Musule, R., & Valdez-Vazquez, I. (2019), Wheat straw, corn stover, sugarcane, and Agave biomasses: chemical properties, availability, and cellulosic-bioethanol production potential in Mexico. *Biofuels, Bioprod. Bioref.*, 13: 1143-1159. <https://doi.org/10.1002/bbb.2017>

- HUA, C., LI, X., XU, S., & BAI, P. (2007). Design and Operation of Batch Extractive Distillation with Two Reboilers. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 15(2), 286–290. doi:10.1016/s1004-9541(07)60072-x
- IEA, I. E. (30 de 4 de 2018). Key World Energy Statistics 2015. Obtenido de https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/KeyWorld_Statistics_2015.pdf
- Kemp, I. C. (2007). Introduction. In *Pinch Analysis and Process Integration: A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy*. Kemp, I.C. (Ed.) Burlington: Elsevier Science, 1–13. <https://doi.org/10.1016/B978-075068260-2.50006-7>
- Linnhoff, B., & Townsend, B W. (1982). *Designing total energy systems*. United States.
- Lutze, P., Gani, R., & Woodley, J.M. (2010). Process intensification: A perspective on process synthesis. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 49 (6), 547–558. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2010.05.002>
- Martinez-Hernandez, E., Sadhukhan, J., & Campbell, G.M. (2013). Integration of bioethanol as an in-process material in biorefineries using mass Pinch analysis. *Applied Energy*, 104, 517–526. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.11.054>
- Moncada, J., Aristizaba, V., & Cardona, C.A. (2016) Design strategies for sustainable biorefineries. *Biochemical Engineering Journal* 116, 122–134. <http://dx.doi.org/10.1016/j.bej.2016.06.009>
- Nhien, L.E., Long, N.V.D., & Lee, M, (2017) Novel heat–integrated and intensified biorefinery process for cellulosic ethanol production from lignocellulosic biomass, *Energy Conversion and Management*, 141, 367–377. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2016.09.077>
- Purbasari, A., Istirokhatun, T., Kusumayanti, H., Meta Devi, A., Mahsunah, L., Susanto, H. (2013) Preparation and Characterization of Zeolite Membrane for Bioethanol Purification. *Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis*, vol. 8, no. 1, 47-53, Jun. 2013. <https://doi.org/10.9767/bcrec.8.1.4062.47-53>
- Da Silva, A. R. G., Torres Ortega, C. E., & Rong, B.-G. (2016). Techno-economic analysis of different pretreatment processes for lignocellulosic-based bioethanol production. *Bioresource Technology*, 218, 561–570. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.07.007>
- Sargent, R.W.H., Westerberg, A.W. , (1964). SPEED-UP (Simulation programme for the economic evaluation and design of unsteady-state processes) in chemical engineering design. *Trans. IChemE*. 42, 190–197.
- Sojitra, R. (2016). Application Algorithm Development of Pinch Technology in Heat Integration Problem. *Journal of Chemical Engineering & Process Technology*, 07(05). <https://doi.org/10.4172/2157-7048.1000314>
- Salim I., Lijo, L., Moreira M.T., & Feijoo G. (2019) Addressing Environmental Criteria and Energy Footprint in the Selection of Feedstocks for Bioenergy Production. In: Muthu S. (Eds.) *Energy Footprints of the Energy Sector*. Environmental Footprints and Eco-design

- of Products and Processes. Springer, Singapore. 1-46. https://doi.org/10.1007/978-981-13-2457-4_1
- Sanchez, A., Sevilla-Güitron, V., Magaña, G., & Gutierrez, L. (2013). Parametric analysis of total costs and energy efficiency of 2G enzymatic ethanol production, *Fuel*, 13, 165-179. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.05.034>.
- Sanford, K., Chotani, G., Danielson, N., & Zahn, J. A. (2016). Scaling up of renewable chemicals. *Current Opinion in Biotechnology*, 38, 112–122. <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2016.01.008>
- Seider, W.D., Seader, J.D., Lewin, D.R., & Widagdo, S. (2000) *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation*. John Wiley & Sons.
- Shenoy U. V. (1995). *Heat Exchanger network Synthesis*”, Gulf Publishing Co.
- Sun Y, Cheng J (2002) Hydrolysis of lignocellulosic materials for ethanol production: a review. *Bioresour Technol* 83:1–11
- Ramos, L. P. (2003). The chemistry involved in the steam treatment of lignocellulosic materials. *Química Nova*, 26(6), 863–871. doi:10.1590/s0100-40422003000600015
- Rezania, S., Oryani, B., Cho, J., Talaiekhosravi, A., Sabbagh, F., Hashemi, B., Rupani, P.F., Mohammadi, A. A. (2020). Different pretreatment technologies of lignocellulosic biomass for bioethanol production: An overview. *Energy*, 199, 117457. doi:10.1016/j.energy.2020.117457
- Rosales-Calderon, O., & Arantes, V. (2019). A review on commercial-scale high-value products that can be produced alongside cellulosic ethanol. *Biotechnology for Biofuels*, 12(1). <https://doi.org/10.1186/s13068-019-1529-1>
- Tian, Y. & Pistikopoulos, E.N. (2019). Synthesis of operable process intensification systems: advances and challenges. *Current Opinion in Chemical Engineering* 25, 101-107. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2018.12.003>
- Vaghari, H., Eskandari, M., Sobhani, V., Berenjian, A., Song, Y., & Jafarizadeh-Malmiri, H. (2015). Process Intensification for Production and Recovery of Biological Products. *American Journal of Biochemistry and Biotechnology*, 11(1), 37–43. <https://doi.org/10.3844/ajbbbsp.2015.37.43>
- Wang, L., Littlewood, J., & Murphy, R. J. (2013). Environmental sustainability of bioethanol production from wheat straw in the UK. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 28, 715–725. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.08.031>
- Wooley, R, Ruth, M, Sheehan, J, Ibsen, K, Majdeski, H, and Galvez, A. (1999) *Lignocellulosic Biomass to Ethanol Process Design and Economics Utilizing Co-Current Dilute Acid Prehydrolysis and Enzymatic Hydrolysis Current and Futuristic Scenarios*. NREL, Golden, CO, NREL/TP-580-26157. doi:10.2172/12150.

- Woiciechowski, A. L., de Souza Vandenberghe, L. P., Karp, S. G., Letti, L. A. J., de Carvalho, J. C., Medeiros, A. B. P., ... Soccol, C. R. (2013). *The Pretreatment Step in Lignocellulosic Biomass Conversion: Current Systems and New Biological Systems. Lignocellulose Conversion*, 39–64. doi:10.1007/978-3-642-37861-4_3
- Yang, S., Fei, Q., Zhang, Y., Contreras, L., Utturkar, S., Brown, S., Zhang, M. (2016). *Zymomonas mobilis as a model system for production of biofuels and biochemicals. Microb Biotechnol*, 699-717. Obtenido de <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC5072187/>

APÉNDICE A. Detalles del diseño de la biorrefinería

Tabla A.1. Resumen de equipos empleados en las etapas de acondicionamiento y pretratamiento.

Intensified configuration		P1S1-WC		P1S2-WC		P2S1-WC		P2S2-WC		Units
Name	Type	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	
Conditioning										
VS-101	Vibrating Screen	1	41.67	1	41.67	1	41.67	1	41.67	t/h
GR-101	Grinder	2	23.99	2	23.99	2	23.99	2	23.99	t/h
VS-102	Vibrating Screen	1	47.98	1	47.98	1	47.98	1	47.98	t/h
PC-101	Pneumatic Conveyor	1	25.00	1	25.00	1	25.00	1	25.00	m
SR-101	Shredder	2	20.83	2	20.83	2	20.83	2	20.83	t/h
MX-101	Mixer	1	47.98	1	47.98	1	47.98	1	47.98	t/h
SC-101	Screw Conveyor	2	15.00	2	15.00	2	15.00	2	15.00	m
Pretreatment										
FS-201	Flow Splitter	1	193.56	1	193.56	-	0.00	-	0.00	t/h
RX-201	Stirred Reactor	3	27.65	3	27.65	-	0.00	-	0.00	m3
BV-201	Blending Tank	1	28.21	1	28.21	1	15.08	1	15.08	m3
HX-203	Heat Exchanger	1	26.20	1	26.20	-	0.00	-	0.00	m2
MX-202	Mixer	1	193.6	1	193.6	1	84.8	1	84.8	t/h
RX-202	Stirred Reactor	1	87.36	1	87.36	-	0.00	-	0.00	m3
RX-203	Stirred Reactor	1	341.9	1	341.9	-	0.00	-	0.00	m3
PM-203	Centrifugal Pump	1	75.36	1	75.36	-	0.00	-	0.00	kW
PM-204	Centrifugal Pump	1	6.24	1	6.24	-	0.00	-	0.00	kW
PM-205	Centrifugal Pump	1	6.11	1	6.11	-	0.00	-	0.00	kW
PM-202	Centrifugal Pump	1	39.29	1	39.29	-	0.00	-	0.00	kW
HX-202	Heat Exchanger	1	23.52	1	23.52	-	0.00	-	0.00	m2
HX-205	Heat Exchanger	1	51.07	1	51.07	-	0.00	-	0.00	m2
MX-201	Mixer	1	98.85	1	98.85	1	84.83	1	84.83	t/h
HX-201	Heat Exchanger	1	15.73	1	15.73	1	85.23	1	85.23	m2
PM-201	Centrifugal Pump	1	5.88	1	5.88	-	0.00	-	0.00	kW
HX-204	Heat Exchanger	2	79.04	2	79.04	-	0.00	-	0.00	m2
GTV-201	Gate Valve	1	2.09	1	2.09	-	0.00	-	0.00	cm
F-202	Rotary Vacuum Filter	8	76.00	8	76.00	-	0.00	-	0.00	m2
RVF-201	Rotary Vacuum Filter	8	78.17	8	78.17	-	0.00	-	0.00	m2
SC-201	Screw Conveyor	3	15.00	3	15.00	2	15.00	2	15.00	m
SC-202	Screw Conveyor	1	6.00	1	6.00	3	15.00	3	15.00	m
V-202	Horizontal Tank	3	79.81	3	79.81	4	60.07	4	60.07	m3
FL-201	Flash Drum	-	0.00	-	0.00	2	1.39	2	1.39	m3
MX-203	Mixer	-	0.00	-	0.00	1	231.3	1	231.3	t/h
PFR-201	Stirred Reactor	-	0.00	-	0.00	1	28.69	1	28.69	m3

Tabla A.2. Resumen de equipos empleados en SSCF y etapas de separación.

Intensified configuration		P1S1-WC		P1S2-WC		P2S1-WC		P2S2-WC		Units
Name	Type	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	
SSCF										
PM-301	Centrifugal Pump	1	8.55	1	8.55	1	8.58	1	8.58	kW
PM-302	Centrifugal Pump	1	8.54	1	8.54	1	8.48	1	8.48	kW
MX-301	Mixer	1	233.30	1	233.30	1	231.65	1	231.7	t/h
HX-301	Heat Exchanger	1	105.9	1	105.9	1	144.5	1	144.5	m2
RX-301	Stirred Reactor	2	2859.3	2	2859.3	2	2838.7	2	2838.7	m3
V-301	Flat bottom tank	2	119.6	2	119.6	2	118.7	2	118.7	m3
Separation										
CD-401	Distillation Col.	1	246.0	1	246.0	1	246.0	1	246.0	m3
HX-401	Heat Exchanger	1	51.32	1	51.08	1	51.02	1	50.78	m2
HX-402	Heat Exchanger	1	112.6	1	112.4	1	111.6	1	111.4	m2
PM-401	Centrif. Pump	1	8.68	1	8.67	1	8.61	1	8.59	kW
PM-402	Centrif. Pump	1	0.79	1	0.79	1	0.78	1	0.78	kW
CD-402	Distillation Col.	1	36.96	1	36.96	1	36.96	1	36.96	m3
HX-403	Heat Exchanger	1	23.40	1	4.01	1	23.45	1	4.01	m2
GAC-401	GAC Adsorber	2	40.40		0.00	2	40.09		0.00	m3
PM-403	Centrif. Pump	1	1.91	1	0.67	1	1.92	1	0.67	kW
GAC-402	Generic Box	1	5.95	-	0.00	1	5.93	-	0.00	t/h
FSP-401	Flow Splitter	1	14.26	-	0.00	1	14.30	-	0.00	t/h
HX-404	Heat Exchanger	1	68.5	1	23.6	1	68.7	1	23.69	m2
MX-401	Mixer	1	224.3	1	18.9	1	222.6	1	18.96	t/h
RVF-401	Rot. Vac. Filter	6	79.4		0.00	6	78.7		0.00	m2
RF-401	Rot. Vac. Filter	-	0.00	2	237.7	-	0.00	2	235.7	m2
CD-403	Distillation Col.	-	0.00	1	20.41	-	0.00	1	20.45	m3
CD-404	Distillation Col.	-	0.00	1	0.43	-	0.00	1	0.43	m3

Tabla A.3. Resumen de equipos empleados en las etapas de acondicionamiento y pretratamiento.

Intensified configuration		P1S1-WC		P1S2-WC		P2S1-WC		P2S2-WC		Units
Name	Type	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	Qty.	Size	
Cogeneration										
HX-502	Condenser	7	98.11	7	97.78	7	98.09	7	97.76	m ²
SG-501	Steam Generator	1	44.97	1	44.85	1	44.96	1	44.83	t/h
GF-501	Centrifugal Fan	1	379.2	1	378.3	1	377.3	1	376.4	10 ³ m ³ /h
SE-501	Extraction Steam Turbine	1	6.70	1	6.68	1	6.70	1	6.68	MW
HX-501	Heat Exchanger	1	420.5	1	419.8	1	416.9	1	416.3	m ²
MX-501	Mixer	1	71.03	1	70.92	1	70.46	1	70.35	t/h
Wastewater Treatment										
CL-601	Clarifier	1	540.3	1	540.3	1	518.0	1	518.0	m ²
FR-601	Rotary Vacuum Filter	1	2.45	1	2.45	1	2.43	1	2.43	m ²
PM-601	Centrifugal Pump	1	8.05	1	8.04	1	7.98	1	7.98	kW
PM-602	Centrifugal Pump	1	8.13	1	8.13	1	8.06	1	8.06	kW
PM-603	Centrifugal Pump	1	8.05	1	8.05	1	7.98	1	7.98	kW
RX-601	Anaerobic Digester	4	113.6	4	113.6	4	112.7	4	112.7	10 ³ m ³
MX-603	Mixer	1	204.1	1	204.1	1	202.4	1	202.4	t/h
RX-602	Aeration Basin	3	127.5	3	127.5	3	126.5	3	126.5	10 ³ m ³
PM-604	Centrifugal Pump	1	0.08	1	0.08	1	0.08	1	0.08	kW
FS-601	Flow Splitter	1	2.04	1	2.04	1	2.02	1	2.02	t/h
PM-605	Centrifugal Pump	1	0.03	1	0.03	1	0.03	1	0.03	kW
MX-602	Mixer	1	202.1	1	202.1	1	200.4	1	200.4	t/h
SV-601	Flat Bottom Tank	2	112.7	2	112.7	2	111.8	2	111.8	m ³
MX-601	Mixer	1	202.1	1	202.1	1	200.4	1	200.4	t/h
V-602	Horizontal Tank	3	75.11	3	75.10	3	74.51	3	74.50	m ³

Tabla A.4. Principales corrientes para los diagramas de flujo del proceso de la biorrefinería

Stream	Total flowrate (kg/h)	Component	Mass comp. (%)
SECTION: CONDITIONING			
Feedstock (sugarcane bagasse)	41666.67	Cellulose	43.71
		Hemicellulose	26.97
		Lignin	13.39
		Ash	1.43
		Other solids	7.50
		Water	7.00
From conditioning to pretreatment	40782.29	Cellulose	44.21
		Hemicellulose	27.28
		Lignin	13.68
		Ash	0.01
		Other solids	7.66
		Water	7.15
From conditioning to cogeneration	884.38	Ash	66.70
		Cellulose	20.59
		Hemicellulose	12.71
SECTION: PRETREATMENT P1			
Dilute sulfuric acid (P14)	193562.00	Sulfuric acid	0.91
		Water	99.09
Gypsum	3803.89	Calcium sulfate	74.72
		Glucose	0.17
		Xylose	1.10
		Calcium hydroxide	5.50
		Water	18.50
From P1 to SSCF	232901.02	Cellulose	7.12
		Hemicellulose	0.78
		Lignin	2.40
		Ash	0.00
		Other solids	1.34
		Glucose	0.69
		Xylose	4.53
		Sulfuric acid	0.05
		Water	83.10
SECTION: PRETREATMENT P2			
From P2 to SSCF	231260.23	Cellulose	7.09
		Hemicellulose	0.79
		Lignin	2.41
		Ash	0.00
		Other solids	1.35
		Xylose	4.57

		Water	83.00
SECTION: CO-FERMENTATION			
Enzymes	398.11	Enzymes	100.00
Nutrients	182.58	Corn liquor	87.63
		DAP	12.37
From SSCF to separation	221759.84	Cellulose	1.50
		Hemicellulose	0.82
		Lignin	2.52
		Ash	0.00
		Other solids	1.41
		Glucose	0.56
		Xylose	0.68
		Sulfuric acid	0.05
		Corn Liquor	0.07
		DAP	0.01
		Enzyme	0.18
		Acetic acid	0.03
		Ethanol	5.53
		<i>Z. mobilis</i>	0.03
		Water	86.62
SECTION: SEPARATION S1			
From separation to wastewater treatment (1)	18930.63	Acetic acid	0.02
		Corn liquor	0.08
		DAP	0.01
		Ethanol	0.08
		Water	99.81
From separation to wastewater treatment (2)	120820.21	Acetic acid	0.02
		Corn liquor	0.03
		Ethanol	0.11
		Water	99.84
From separation to cogeneration	69985.08	Cellulose	4.74
		Hemicellulose	2.59
		Lignin	7.97
		Ash	0.01
		Other solids	4.47
		Glucose	1.78
		Xylose	2.14
		Sulfuric acid	0.17
		Corn liquor	0.15
		DAP	0.03
		Enzyme	0.57
		Acetic acid	0.06
		Ethanol	0.01
		<i>Z. mobilis</i>	0.09

		Water	75.22
Anhydrous Ethanol	12123.92	Ethanol	99.95
		Water	0.05
SECTION: SEPARATION S2			
Solvent (recovered and recycled)	6430.00	Glycerol	100.00
From separation	18895.64	Acetic acid	0.02
to wastewater treatment (1)		Corn liquor	0.08
		DAP	0.01
		Ethanol	0.06
		Water	99.82
From separation	120590.54	Acetic acid	0.02
to wastewater treatment (2)		Corn liquor	0.03
		Ethanol	0.10
		Water	99.86
From separation	69892.12	Cellulose	4.75
to cogeneration		Hemicellulose	2.59
		Lignin	7.98
		Ash	0.01
		Other solids	4.47
		Glucose	1.78
		Xylose	2.14
		Sulfuric acid	0.17
		Corn liquor	0.15
		DAP	0.03
		Enzyme	0.57
		Acetic acid	0.06
		Ethanol	0.01
		<i>Z. mobilis</i>	0.09
		Water	75.19
Anhydrous Ethanol	12128.85	Ethanol	99.94
		Water	0.06

Tabla A.5. Corrientes calientes y frías para el análisis de integración de calor de las configuraciones intensificadas.

Stream*	Equipment	T_{in} (°C)	T_{out} (°C)	Q (MW)
P1S1-WC				
H1	CD-401	78	78	29.43
H2	HX-205	90	31	10.20
H3	HX-301	49	30	4.77
H4	HX-402	100	26	15.57
H5	HX-204	191	90	25.12
H6	CD-402	80	80	9.49
H7	HX-404	150	31	3.91
C1	HX-203	25	190	25.76
C2	CD-401	100	100	26.30
C3	HX-401	35	95	18.26
C4	HX-202	90	190	9.33
C5	HX-201	25	90	6.07
C6	CD-402	100	100	10.00
C7	HX-403	78	150	4.37
P1S2-WC				
H1	HX-205	90	31	10.20
H2	HX-301	49.3	30	4.77
H3	HX-204	191.3	90	25.12
H4	CD-401	78	78	28.52
H5	HX-402	100	26	15.54
H6	CD-402	80	80	8.75
H7	CD-403	78.3	78.3	6.24
H8	CD-404	100	100	0.23
H9	HX-404	78.3	26	0.43
H10	HX-403	233.6	78	0.67
C1	HX-203	25.1	190	25.76
C2	HX-202	90.1	190	9.33
C3	HX-201	25	90	6.07
C4	CD-401	100	100	25.95
C5	HX-401	31	95	18.50
C6	CD-402	100	100	9.25
C7	CD-403	99.2	99.2	6.32
C8	CD-404	233.6	233.6	0.81
P2S1-WC				
H1	CD-401	78	78	29.32
H2	HX-301	76.8	30	11.49
H3	HX-402	100	26	15.44
H4	CD-402	80	80	9.47
H5	HX-404	150	31	3.92
H6	FL-201	90	90	32.04
C1	CD-401	100	100	26.17
C2	HX-401	34.7	95	18.15
C3	CD-402	100	100	9.97
C4	HX-403	78.2	150	4.38
C5	HX-201	25	180	15.82
P2S2-WC				
H1	HX-301	76.8	30	11.49
H2	CD-401	78	78	28.38
H3	HX-402	100	26	15.42
H4	CD-402	80	80	8.72
H5	CD-403	78.3	78.3	6.25

H6	CD-404	100.1	100.1	0.23
H7	HX-404	78.3	26	0.43
H8	HX-403	233.6	78	0.67
H9	FL-201	90	90	32.04
C1	CD-401	100	100	25.80
C2	HX-401	31	95	18.39
C3	CD-402	100	100	9.22
C4	CD-403	99.2	99.2	6.34
C5	CD-404	233.6	233.6	0.81
C6	HX-201	25	180	15.82

APÉNDICE B. Resúmenes ejecutivos de los diseños

Tabla B.1. Resumen ejecutivo de los diseños básicos de la biorrefinería 2G.

Concepto	Valores				Unidades*
	P1S1	P1S2	P2S1	P2S2	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330	330	330	330	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	10 ³ t/año
Electricidad total req.	49.47	50.78	46.54	47.83	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	137.32	140.02	140.25	142.92	Mt/año
Vapor total req.	820.26	894.08	734.55	808.21	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	640.76	583.03	327.92	270.00	10 ³ t/año
Electricidad generada	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vapor generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vap. AP generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Aguas residuales	1521	1521	1509	1509	10 ³ t/año
Residuos sólidos	170.49	170.30	145	145	10 ³ t/año
CO ₂	92.84	92.84	93.10	93.10	10 ³ t/año
Y_{int} ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$)	0.98	0.99	0.89	0.90	-
EROI	0.48	0.47	0.55	0.54	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.67	17.67	14.86	14.86	M\$/año
Servicios auxiliares	36.21	36.80	31.43	32.01	M\$/año
Costo de equipos	27.41	27.16	17.75	17.50	M\$
Inversión	85.85	85.09	55.61	54.82	M\$
Costo de operación anual	116.53	116.98	101.13	101.57	M\$/año
Etanol UPC	0.95	0.96	0.82	0.83	\$/L

Tabla B.2. Resumen ejecutivo de los diseños de la biorrefinería 2G con tratamiento de aguas residuales

Conceptos	Valores				Unidades*
	P1S1-W	P1S2-W	P2S1-W	P2S2-W	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330	330	330	330	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	10 ³ t/año
Electricidad total req.	64.49	65.80	61.44	62.74	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	139.49	142.23	142.41	145.11	Mt/año
Vapor total req.	820.26	894.08	734.55	808.21	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	640.76	583.03	327.92	270.00	10 ³ t/año
Electricidad generada	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vapor generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vap. AP generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Aguas residuales	416	415	413	412	10 ³ t/año
Residuos sólidos	170.82	170.59	145	145	10 ³ t/año
CO ₂	93.58	93.49	93.85	93.75	10 ³ t/año
Y_{int} ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$)	0.73	0.74	0.64	0.65	-
EROI	0.47	0.47	0.54	0.53	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.67	17.67	14.86	14.86	M\$/año
Servicios auxiliares	37.93	38.53	33.13	33.72	M\$/año
Costo de equipos	31.05	30.81	21.39	21.14	M\$
Inversión	97.28	96.51	67.01	66.23	M\$
Costo de operación anual	97.54	97.97	82.31	82.73	M\$/año
Etanol UPC	0.79	0.80	0.67	0.67	\$/L

Tabla B.3. Resumen ejecutivo de los diseños de la biorrefinería 2G con tratamiento de aguas residuales y cogeneración

Conceptos	Valores				Unidades*
	P1S1-WC	P1S2-WC	P2S1-WC	P2S2-WC	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330	330	330	330	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	10 ³ t/año
Electricidad total req.	74.07	75.36	70.96	72.24	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	165.97	168.62	168.88	171.50	Mt/año
Vapor total req.	820.26	894.08	734.55	808.21	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	640.76	583.03	327.92	270.00	10 ³ t/año
Electricidad generada	47.84	47.69	47.82	47.67	10 ³ t/año
Vapor generado	224.39	223.77	224.31	223.69	10 ³ t/año
Vap. AP generado	99.73	99.45	99.69	99.42	10 ³ t/año
Aguas residuales	246	245	247	246	10 ³ t/año
Residuos sólidos	24.55	24.55	0	0	10 ³ t/año
CO ₂	273.02	281.81	272.98	272.63	10 ³ t/año
Y_{int} ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$)	0.63	0.65	0.55	0.56	-
EROI	0.49	0.48	0.56	0.55	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.74	17.74	14.93	14.93	M\$/año
Servicios auxiliares	32.78	33.42	28.07	28.71	M\$/año
Costo de equipos	34.85	34.59	25.17	24.92	M\$
Inversión	109.16	108.37	78.85	78.05	M\$
Costo de operación anual	77.44	77.94	62.43	62.93	M\$/año
Etanol UPC	0.63	0.64	0.51	0.51	\$/L

Tabla B.4. Resumen ejecutivo de los diseños básicos de la biorrefinería 2G con integración de calor

Conceptos	Valores				Unidades*
	P1S1-H	P1S2-H	P2S1-H	P2S2-H	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330	330	330	330	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	10 ³ t/año
Electricidad total req.	49.47	50.78	46.54	47.83	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	137.32	140.02	140.25	142.92	Mt/año
Vapor total req.	820.26	894.08	734.55	808.21	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	640.76	583.03	327.92	270.00	10 ³ t/año
Electricidad generada	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vapor generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vap. AP generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Aguas residuales	1521	1521	1509	1509	10 ³ t/año
Residuos sólidos	170.49	170.30	145	145	10 ³ t/año
CO ₂	92.84	92.84	93.10	93.10	10 ³ t/año
Y_{int} ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$)	0.76	0.77	0.80	0.81	-
EROI	1.06	1.00	0.73	0.71	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.67	17.67	14.86	14.86	M\$/año
Servicios auxiliares	18.67	19.60	24.23	25.10	M\$/año
Costo de equipos	27.41	27.16	17.75	17.50	M\$
Inversión	85.85	85.09	55.61	54.82	M\$
Costo de operación anual	98.16	98.96	93.59	94.32	M\$/año
Etanol UPC	0.80	0.81	0.76	0.77	\$/L

Tabla B.5. Resumen ejecutivo de los diseños de la biorrefinería 2G con tratamiento de aguas residuales e integración de calor

Conceptos	Valores				Unidades*
	P1S1-WH	P1S2-WH	P2S1-WH	P2S2-WH	
Resumen técnico					
Materia prima (base húmeda)	330	330	330	330	10 ³ t/año
Producción de etanol	122.99	122.36	123.34	122.70	10 ³ t/año
Electricidad total req.	64.49	65.80	61.44	62.74	10 ³ MW/año
Enfriamiento total req.	139.49	142.23	142.41	145.11	Mt/año
Vapor total req.	820.26	894.08	734.55	808.21	10 ³ t/año
Vap. AP total req.	640.76	583.03	327.92	270.00	10 ³ t/año
Electricidad generada	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vapor generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Vap. AP generado	0.00	0.00	0.00	0.00	10 ³ t/año
Aguas residuales	416	415	413	412	10 ³ t/año
Residuos sólidos	170.82	170.59	145	145	10 ³ t/año
CO ₂	93.58	93.49	93.85	93.75	10 ³ t/año
Y_{int} ($w_1 = w_2 = w_3 = 0.33$)	0.50	0.52	0.55	0.56	-
EROI	1.02	0.96	0.72	0.69	kW/kW
Resumen económico					
Materia prima	17.67	17.67	14.86	14.86	M\$/año
Servicios auxiliares	20.39	21.32	25.93	26.81	M\$/año
Costo de equipos	31.05	30.81	21.39	21.14	M\$
Inversión	97.28	96.51	67.01	66.23	M\$
Costo de operación anual	79.17	79.95	74.76	75.48	M\$/año
Etanol UPC	0.64	0.65	0.61	0.62	\$/L