



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

CAMPUS D'ALCOI

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Politécnica Superior de Alcoy

Diseño del proceso de producción de bioetanol

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Química

AUTOR/A: Muñoz Ortuño, Lucía

Tutor/a: Santos-Juanes Jordá, Lucas

Cotutor/a: Vicente Candela, Rafael

CURSO ACADÉMICO: 2021/2022

Resumen

En este proyecto fin de grado se ha estudiado la viabilidad de un proceso de producción de bioetanol a escala industrial. Se ha fijado una producción de 10 toneladas al año. Se han contrastado y seleccionado las diferentes condiciones del proceso, así como materias primas y el microorganismo a utilizar a partir de artículos, libros y revistas científicas. El microorganismo utilizado ha sido *Saccharomyces cerevisiae*, en unas condiciones de *pH* a 5.5 y una temperatura de 30°C que son las adecuadas para este microorganismo. La fuente de carbono del proceso se ha elegido la glucosa a partir de biomasa lignocelulósica. Se han escalado las cantidades de cada materia prima, así como el volumen y dimensiones de los equipos junto con el diseño de dos torres de destilación para la purificación del bioetanol y que este pueda ser utilizado como biocombustible. Finalmente, se ha realizado un análisis económico de la viabilidad de la planta mediante el uso de herramientas con el VAN, el TIR y el Pay-Back. Además, se ha incluido un diseño de la planta para tener una idea espacial del proceso.

Palabras clave: Biocombustible, bioetanol, biomasa lignocelulósica, *Saccharomyces cerevisiae*, producción

Abstract

The feasibility of an industrial-scale bioethanol production process has been studied in this end-of-degree project. A production of 10 tons per year has been set. The different process conditions, as well as raw materials and the microorganism to be used have been contrasted and selected from articles, books and scientific journals. The microorganism used was *Saccharomyces cerevisiae*, in conditions of *pH* at 5.5 and a temperature of 30°C, which are suitable for this microorganism. The carbon source of the process was chosen glucose from lignocellulosic biomass. The quantities of each raw material have been scaled, as well as the volume and dimensions of the equipment along with the design of two distillation towers for the purification of bioethanol so that it can be used as biofuel. Finally, an economic analysis of the plant's feasibility has been carried out using NPV, IRR and Pay-Back tools. In addition, a plant design has been included to get a spatial idea of the process.

Keywords: Biofuel, bioethanol, lignocellulosic biomass, *Saccharomyces cerevisiae*, production.

ÍNDICE

RESUMEN	1
ABSTRACT	1
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 BIOCMBUSTIBLES	1
1.2 BIOETANOL	2
1.3 PROCESOS DE OBTENCIÓN DEL BIOETANOL	6
1.4 MATERIAS PRIMAS	7
1.5 BIOMASA.....	9
1.6 BIOMASA LIGNOCELULÓSICA	9
1.7 OBTENCIÓN DE BIOETANOL A PARTIR DE BIOMASA LIGNOCELULÓSICA	12
1.8 PRODUCTOS	19
2 OBJETIVOS	21
3 METODOLOGÍA	22
3.1 DESCRIPCIÓN DEL MICROORGANISMO ELEGIDO Y LAS CONDICIONES DE TRABAJO.....	22
3.2 MATERIAS PRIMAS	23
3.3 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE OBTENCIÓN DE BIOETANOL A PARTIR DE CÁSCARA DE ARROZ	26
3.4 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO Y ESCALADO	30
3.5 DESCRIPCIÓN DEL ESTUDIO ECONÓMICO	32
4 EXPERIMENTAL (CÁLCULO)	36
4.1 CÁLCULOS DE LAS COLUMNAS DE PURIFICACIÓN	36
4.2 CÁLCULOS DEL TAMAÑO DEL FERMENTADOR/FERMENTADORES	47
4.3 CÁLCULO DEL ESCALADO, DIÁMETROS Y ALTURA DE LOS FERMENTADORES.....	51
4.4 CÁLCULO DE LAS CANTIDADES NECESARIAS DE MATERIAS PRIMAS PARA EL PROCESO DE FERMENTACIÓN	53
4.5 CÁLCULOS DEL TAMAÑO DEL REACTOR DEL PROCESO DE HIDRÓLISIS	65
4.6 CÁLCULOS DEL TAMAÑO DEL REACTOR DEL PROCESO DE PRETRATAMIENTO	69
5 ESTUDIO ECONÓMICO	71

5.1	PRESUPUESTO DE INVERSIÓN	71
5.2	PRESUPUESTO DE EXPLOTACIÓN	72
5.3	VAN	78
5.4	TIR.....	79
5.5	PAY-BACK	80
6	DISEÑO DE LA INSTALACIÓN	81
7	CONCLUSIONES	83
8	BIBLIOGRAFÍA	84
9	ANEXOS	87
9.1	ANEXO SCRIPT PRINCIPAL	87
9.2	ANEXO DATOS DE EQUILIBRIO.....	92
9.3	ANEXO RMIN	95
9.4	ANEXO NÚMERO DE ETAPAS MÍNIMAS	95
9.5	ANEXO NÚMERO DE ETAPAS IDEALES	96
9.6	ANEXO NÚMERO DE ETAPAS REALES	98
9.7	ANEXO CÁLCULO DE DIÁMETRO DE PLATOS	99

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Comparación de las propiedades del bioetanol y gasolina	3
Tabla 2. Producción de cáscara de arroz en España	9
Tabla 3. Rendimiento obtenido y condiciones de trabajos con el microorganismo seleccionado	23
Tabla 4. Porcentajes de material lignocelulósico en la cáscara de arroz	24
Tabla 5. Condiciones de trabajo para el proceso de pretratamiento	27
Tabla 6. Condiciones de trabajo para el proceso de hidrólisis ácida	28
Tabla 7. Condiciones de trabajo del proceso de separación	29
Tabla 8. Caudales del destilador 1	38
Tabla 9. Caudales del destilador 2	39
Tabla 10. Datos para obtener el diámetro y la altura del lecho interno de zeolita	40
Tabla 11. Condiciones de diseño del primer destilador	45
Tabla 12. Condiciones de diseños del segundo destilador	46
Tabla 13. Reactor/es y su tamaño	50
Tabla 14. Reactor/es y su volumen operativo obtenido	51
Tabla 15. Resumen de los kg de glucosa necesaria	54
Tabla 16. Resumen de los kg de celulosa necesarios	55
Tabla 17. Resumen de los kg de cáscara de arroz necesarios	57
Tabla 18. Resumen de los kg de fuente de nitrógeno necesarios	59
Tabla 19. Resumen de los kg de fuente de fosfato necesarios	60
Tabla 20. Resumen de los kg necesarios de $MgSO_4$	61
Tabla 21. Cantidad de sulfato de magnesio comercial	62
Tabla 22. Resumen de los Kg de $ZnSO_4$ necesarios	63
Tabla 23. Cantidad de $ZnSO_4$ comercial necesaria	64
Tabla 24. Cantidad de <i>S. cerevisiae</i> necesarias	65
Tabla 25- Cantidad de celulosa necesaria para completar un ciclo	65
Tabla 26. Resumen de las cantidades de NaOH necesarias	69
Tabla 27. Presupuestos de inversión	71
Tabla 28. Costes de materia prima	72
Tabla 29. Salarios de los trabajadores	73
Tabla 30. Costes de energía	74
Tabla 31. Costes de agua	75
Tabla 32. Costes de mantenimiento	75
Tabla 33. Coste total de las amortizaciones	76
Tabla 34. Presupuesto de inversión y de explotación	77

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1. Ciclo del bioetanol _____	4
Ilustración 2. Procesos de obtención del bioetanol de primera y segunda generación _____	7
Ilustración 3. Procesos de producción de bioetanol de primera, segunda y tercera generación _____	7
Ilustración 4. Estructura de la biomasa lignocelulósica _____	10
Ilustración 5. Estructura de la celulosa _____	10
Ilustración 6. Estructura de la Hemicelulosa _____	11
Ilustración 7. Estructura interna de la lignina _____	12
Ilustración 8. Efecto del pretratamiento en la materia lignocelulósica _____	13
Ilustración 9. Proceso de hidrólisis ácida sobre celulosa _____	15
Ilustración 10. Reacción de la fermentación alcohólica _____	17
Ilustración 11. Esquema del proceso de destilación extractiva _____	19
Ilustración 12. Productos y subproductos obtenidos de la producción de bioetanol a partir de masa lignocelulósica _____	20
Ilustración 13. Tanque de pretratamiento _____	30
Ilustración 14. Tanque de hidrólisis ácida _____	31
Ilustración 15. Fermentador _____	31
Ilustración 16. Columna de destilación _____	32
Ilustración 17. Evolución del número de etapas variando el factor de relación de reflujo _____	45
Ilustración 18. Diseño de la planta _____	81

1. Introducción

La sociedad actual está envuelta en un continuo desarrollo, la industrialización y el avance tecnológico logrado en el último siglo ha sido posible gracias al uso efectivo de la energía, tanto así, que su tasa de consumo se ha convertido en el parámetro con el cual se mide el desarrollo de las naciones y el nivel de vida de las personas. Sin embargo, las fuentes energéticas utilizadas mayoritariamente a lo largo de este periodo, han sido la causa directa para varios problemas tanto a nivel económico, social y ambiental.

El acelerado crecimiento de la población, la grave crisis ambiental, el agotamiento de los recursos y los desequilibrios sociales, son factores que obligan a acometer una nueva política energética.

La problemática referente al uso de combustibles fósiles no se enfoca únicamente en su futuro agotamiento, sino también en las consecuencias que los gases de combustión han provocado en el medio ambiente. El dióxido de carbono emitido por las máquinas térmicas utilizadas en la industria y el transporte aportan en forma importante al efecto invernadero, además de la emisión de otros compuestos no deseados como óxido de azufre y óxido de nitrógeno. (Morales, 2014)

Debido al impacto ambiental que supone el uso de los combustibles fósiles y al consumo, cada vez mayor de los combustibles fósiles, se han propuesto diferentes alternativas. Una de las alternativas renovables son el uso de las llamadas bioenergías o biocombustibles, ya que contribuyendo así con la disminución en el uso de combustibles fósiles y de las de emisiones de gases de efecto invernadero, además estos provienen de fuentes renovables.

Las bioenergías o biocombustibles son una de las alternativas que han tomado mayor fuerza para convertirse en el principal proveedor energético de la humanidad, este tipo de energía proviene del proceso de conversión de recursos biorenovables; los cuales, por definición, “son recursos naturales que se pueden restaurar por procesos naturales a una velocidad superior a la del consumo”

Uno de los biocombustibles más utilizados se trata del llamado bioetanol, ya que absorben el CO_2 y emiten prácticamente la misma cantidad que los combustibles convencionales.

1.1 Biocombustibles

Los biocombustibles se definen como los combustibles obtenidos de la biomasa provenientes de materia orgánica de las actividades agrícola, pecuaria, silvícola, acuicultura, algacultura, residuos de la pesca, domésticas, comerciales, industriales, de microorganismos y de enzimas, así como sus derivados producidos por procesos tecnológicos sustentables

Para la obtención de biocombustibles se transforma la biomasa, materia de origen orgánico, vegetal o animal, a través de procesos mecánicos, termoquímicos y biológicos. Así, en función del origen de la materia prima y de los procesos utilizados para la obtención los biocombustibles son clasificados en generaciones:

- **Biocombustibles de primera generación:** consiste en combustibles obtenidos a partir de cultivos agrícolas alimentarios
- **Biocombustibles de segunda generación o avanzados:** son los que provienen de los residuos de los cultivos, de las industrias agroalimentarias, y de la fracción orgánica de los residuos urbanos. También se consideran biocombustibles de segunda generación aquellos que se obtienen a partir de cultivos agroforestales que no se destinan a la alimentación.
- **Biocombustibles de tercera generación:** estos combustibles se extraen de algas y plantas acuáticas con un contenido de aceite natural de al menos un 50 %. La producción de este biocombustible aún no se ha llevado a cabo a escala comercial, pero existen estudios de factibilidad concluyentes.
- **Biocombustibles de cuarta generación:** la cuarta generación va un paso más allá y lo que busca es modificar genéticamente los microorganismos para mejorar la eficiencia en la captación y almacenamiento del CO₂. Estos biocombustibles tampoco se comercializan por el momento, aunque existen plantas piloto en Brasil y Estados Unidos.

Uno de los biocombustibles más usados y desarrollados es el bioetanol.

1.2 Bioetanol

1.2.1 ¿Qué es?

El bioetanol es un producto químico líquido, incoloro, volátil, y con un olor característico, el cual se obtiene a partir de la fermentación de los azúcares que se encuentran en los productos vegetales, como pueden ser: cereales, remolacha, caña de azúcar o biomasa. Estos azúcares se encuentran combinados en forma de sacarosa, almidón, hemicelulosa y celulosa. El bioetanol es un **alcohol etílico** de alta pureza, anticorrosivo y oxigenante que puede ser empleado como combustible mezclándolo con las naftas en diferentes proporciones, producido por la reacción de fermentación de materia orgánica rica en azúcar. Este biocombustible se puede usar en motores de explosión como aditivo o como sustitutivo de la gasolina.

1.2.2 Características del bioetanol

El bioetanol tiene las mismas características y composición química que el etanol, ya que se trata del mismo compuesto. La diferencia radica en su proceso de producción, ya que el bioetanol se obtiene a partir de la biomasa, mientras que el etanol se obtiene mediante derivados del petróleo.

El bioetanol comparte unas propiedades físico-químicas muy parecidas a la gasolina, motivo por el cual puede sustituirla parcial y/o totalmente en los motores de combustión interna. Las propiedades de interés para el estudio del comportamiento de etanol como combustible en motores de automóvil se muestran en la siguiente tabla 1:

Tabla 1: Comparación de las propiedades del bioetanol y gasolina

Compuesto	Gasolina	Etanol
Poder calorífico (MJ/L)	20.000	32.200
Densidad (kg/L)	790	810
Peso molecular (g/mol)	46	46
Punto de ebullición (°C)	-114	-114.1
P.fusión normal (°C)	78	78.6

Según la AIE (Agencia Internacional de Energía), la producción de etanol aumentó un 3 % a nivel mundial en 2017, alcanzando los 104 mil millones de litros de producción. El aumento de la producción se realizó principalmente en los EE. UU., la Unión Europea y China. Actualmente se espera que la producción de etanol se expanda a una tasa de crecimiento anual promedio del 2 por ciento, alcanzando los 119 mil millones de litros para 2023 (Voegelé, 2018). Sin embargo, se requiere de una cantidad considerable de energía para poder obtener bioetanol, de la que una parte tiene origen fósil. No obstante, en España en el año 2015, el Gobierno aprobó el Real Decreto 1085/2015, de 4 de diciembre, de fomento de los biocarburantes, se aprueban una serie de medidas para fomentar la utilización de biocarburantes con fines de transporte.

Para producir el bioetanol, se utiliza un proceso conocido: la fermentación alcohólica. Se parte de almidón o de celulosa, que se somete a un proceso de hidrolización para poder obtener glucosa, y después, se lleva a cabo la fermentación para poder obtener el etanol. Este proceso de fermentación se lleva a cabo por acción de las levaduras, que en su actividad metabólica usan la glucosa como fuente de carbono y energía,

produciendo en el proceso un producto mayoritario asociado al crecimiento en condiciones anaerobias que es el etanol.

Al ser una biomasa de origen vegetal, el bioetanol es considerado una energía renovable y su empleo disminuye ampliamente la emisión de gases contaminantes a la atmósfera, lo que es un gran aporte para disminuir la contaminación ambiental y como consecuencia, el calentamiento global. Los pretratamientos típicos pueden incluir procesos físicos, químicos, fisicoquímicos o biológicos. El contenido de celulosa, hemicelulosa y lignina varía entre las materias primas. Esta variabilidad puede requerir diferentes enfoques para los pretratamientos. Finalmente, tras de un pretratamiento exitoso, la celulosa puede ser hidrolizada en azúcares y convertida en bioetanol a través de la fermentación.

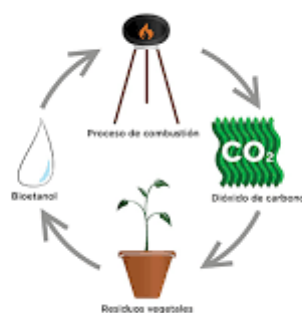


Ilustración 1. Ciclo del bioetanol

La utilización de etanol como combustible posee múltiples ventajas, puesto que es soluble en todas las gasolinas, posee un alto índice de octanaje, lo cual permite mejorar las características del combustible con el que se mezcle, además es un componente libre de compuestos aromáticos, de benceno y de azufre, disminuyendo la generación de ácido sulfhídrico, ahorrando energía en la refinación, y reduciendo las emisiones tóxicas.

1.2.3 Usos del Bioetanol

Las principales aplicaciones del bioetanol son como combustible, aunque también puede ser utilizado como aditivo de gasolinas para producir etil terc-butil eter (ETBE) y aditivo para una mejor ignición de los motores diésel.

1.2.3.1 Bioetanol como combustible

Actualmente para poder utilizar el etanol como combustible en los automóviles de explosión es necesario llevar a cabo una serie de transformaciones relacionadas principalmente con el depósito, los inyectores, las

conducciones del combustible, el sistema informático encargado de la gestión del motor y el sistema anti-sifón.

La mezcla de etanol y gasolina más ampliamente usada es la E85, en la cual el 85% de la mezcla es etanol y el 15% restante es gasolina. El problema de este tipo de mezclas es que el etanol tiene menor energía por litro que las gasolinas, por lo tanto, su rendimiento se deduce considerablemente. En cambio, el octanaje del etanol es mayor y por lo tanto no se quema tan eficientemente como en los motores tradicionales.

1.2.3.2 Bioetanol como aditivo

En este tipo de aplicaciones el etanol es añadido a otros combustibles para mejorar sus características. Estas mezclas pueden emplear diferentes porcentajes de bioetanol, dando lugar a diferentes tipos de biocombustibles y por consiguiente diferentes características finales. Entre dichos biocombustibles se pueden destacar el E5, E10, E85 e incluso E95, los cuales tienen porcentajes de bioetanol del 5%, 10%, 85% y 95% respectivamente.

Otro de los combustibles al que se le ha añadido bioetanol es al diésel, aunque esta mezcla todavía se encuentra en fase de desarrollo ya que existen barreras técnicas a superar como su bajo punto de inflamación y volatilidad y la inestabilidad que presenta la emulsión, pudiendo llegar a evitar la separación de ambos componentes a bajas temperaturas.

Este tipo de mezclas están compuestas por un 15% de etanol, lo cual permitiría reducir en gran medida las emisiones de partículas y otros contaminantes, así como mejorar las características de arranque en frío.

También hay que destacar otros usos del bioetanol aparte de como combustible, como pueden ser:

- **Sistemas de calefacción.** En las viviendas o establecimientos donde tienen un sistema de calefacción en el que se utiliza gas natural, se está alentando para reemplazar este combustible fósil con bioetanol.
- **Limpiezas de océanos.** Además de ser respetuoso con el medio ambiente, el bioetanol puede ser utilizado para eliminar otro tipo de contaminación, como con los derrames petroleros y la grasa presente en el agua.
- **Disolvente de uso industrial.** Al igual que se ha potencializado el uso de bioetanol para la limpieza de aguas contaminadas, este producto también funciona como disolvente industrial.
En miles de fábricas a nivel mundial, el bioetanol sirve para la limpieza de metales sin dejar una huella tóxica en el ambiente ni perjudicar la salud de los trabajadores
- **Lubricantes para motores.** El bioetanol, utilizado como combustible de vehículos, tiene el potencial de reducir el porcentaje de azufre dentro de este componente, ofreciendo mayor lubricidad.

Esto no solo aumenta la eficiencia del motor, sino que además incrementa su vida útil y evita fallas tempranas a causa de la corrosión.

1.3 Procesos de obtención del bioetanol

A lo largo de los años, las técnicas para la producción de bioetanol han ido evolucionando, pudiendo llegar a distinguirse tres generaciones de producción de bioetanol en función del tipo de materia prima utilizada.

Los procesos que intervienen en las tres generaciones del bioetanol incluyen:

- Pretratamiento.
- Hidrólisis, aunque este proceso no es necesario si se trata del bioetanol de primera generación.
- La conversión de los azúcares obtenidos en bioetanol mediante un proceso de fermentación.
- Destilación o deshidratación.

Dependiendo de la materia prima que se esté utilizando se necesitan unas condiciones de pretratamiento diferente, para así liberar los azúcares en el medio. Sin el pretratamiento, el proceso de fermentación puede ser más lento debido a la limitada disponibilidad de azúcares fermentables para el metabolismo. Además, la genética de las materias primas puede contribuir a las variaciones en el contenido de azúcar e influir en el rendimiento del etanol en la fermentación. En la actualidad, se están investigando métodos de producción de bioetanol de cuarta generación, que utilizan organismos modificados genéticamente para mejorar la eficiencia de la fermentación. Sin embargo, estos enfoques aún no se aplican a escala industrial.

La primera generación se basa en aprovechar los azúcares y almidón presente principalmente en la caña de azúcar y el maíz. La producción de bioetanol de primera generación se practica ampliamente en muchos países, aunque la materia prima utiliza varía. La materia prima más común en Estados Unidos es el maíz, mientras que en Canadá se utilizan tanto el maíz como el trigo. En Brasil, la caña de azúcar es la materia prima más común, y en Europa, la industria del etanol suele utilizar patatas, trigo y remolacha azucarera. A diferencia del alto contenido de almidón o azúcar de las materias primas de primera generación, el bioetanol de segunda generación suele utilizar materiales lignocelulósicos y residuos agrícolas forestales. Las fuentes de biomasa lignocelulósica están compuestas predominantemente por celulosa, hemicelulosa y lignina. Estas moléculas suelen formar estructuras muy compactas y resistentes debido a sus fuertes enlaces covalentes y a los extensos enlaces de van der Waal e hidrógeno. Esto hace que se deban aplicar procesos de pretratamiento para alterar las estructuras de la lignocelulosa antes de iniciar los procesos de biorrefinería y fermentación

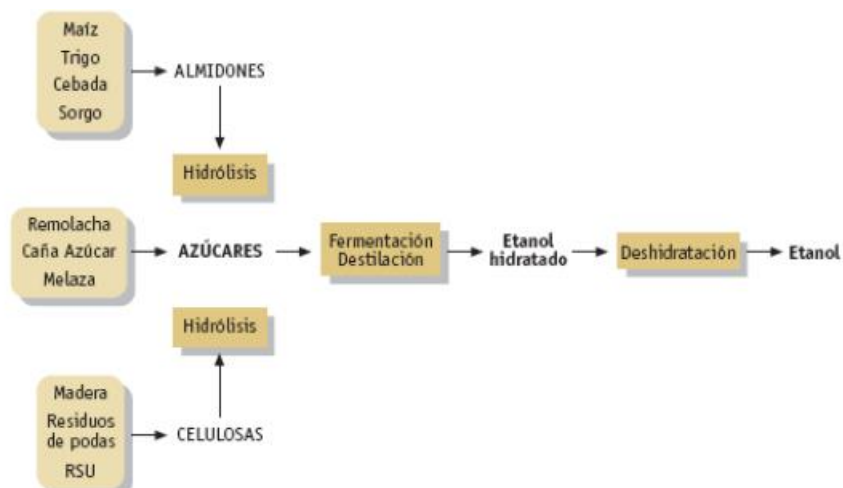


Ilustración 2. Procesos de obtención del bioetanol de primera y segunda generación

El bioetanol de tercera generación utiliza biomasa de algas para la producción de etanol. El empleo de algas como materia prima del bioetanol puede ser ventajoso, ya que las algas pueden absorber rápidamente dióxido de carbono, acumulan altas concentraciones de lípidos y carbohidratos, son fáciles de cultivar y requieren menos tierra que las plantas terrestres. Al igual que el bioetanol de segunda generación la producción de bioetanol de tercera generación también requiere un tratamiento previo para alterar las células de las algas. Tras el pretratamiento los hidratos de carbono complejos se convierten más fácilmente en azúcares fermentables a través de la hidrólisis hidrólisis enzimática, a través de un proceso conocido como sacarificación. Aunque la producción de bioetanol de tercera generación es menos importante que la de las dos primeras, la tecnología implicada es más reciente, y se están estudiando y modificando las especies de algas para identificar y criar especies o mezclas de especies más productivas. (Timothy J. Tse 1, 2021)

Ilustración 3. Procesos de producción de bioetanol de primera, segunda y tercera generación

1.4 Materias primas

Para la fabricación de bioetanol se pueden utilizar una gran variedad de materias primas. Según el origen de éstas, se puede clasificar el biogás como de primera o de segunda generación.

En el caso del bioetanol de primera generación es el que proviene de la biomasa, especialmente de cultivos agrícolas que están destinado a la alimentación humana, mientras que el bioetanol de segunda generación procede de biomasa que no compite con la producción de alimentos.

Entre las principales materias primas que se han utilizado para la fabricación de bioetanol se puede destacar tanto la caña de azúcar como el maíz, aunque también se utilizan en menor proporción la remolacha, el trigo y algunos residuos forestales.

Otra alternativa a las cosechas dedicadas a fines energéticos es el uso de residuos de procesos agrícolas, forestales o industriales, con alto contenido en biomasa. Estos residuos pueden ir desde la paja de cereal, hasta los Residuos Sólidos Urbanos (RSU) o las cáscaras de cereal o arroz. La ventaja de este tipo de residuos es su bajo coste, ya que son la parte no deseada de otros productos o procesos. Los RSU tienen un alto contenido en materia orgánica que los hace una fuente de materia prima con mucho potencial, aunque debido a su diversa procedencia pueden contener otros materiales no deseados, haciendo así que sea necesario el uso de un pretratamiento de separación el cual incrementa el precio en la obtención de bioetanol.

Como se ha indicado anteriormente, las materias primas correspondientes a desechos agrícolas, forestales o industriales suponen una gran ventaja económica en el proceso de producción de bioetanol, debido a que abaratan bastante dicho proceso. Por este motivo, este proyecto se va a centrar exclusivamente en las materias primas relativas a residuos.

Dentro de estos residuos, se excluyen los RSU, que como se ha explicado antes suelen requerir un pre-proceso de separación, lo que aumentaría los costes de producción. Se van a analizar principalmente los residuos agrícolas.

Los residuos agrícolas son aquellos que proceden de cultivos leñosos y herbáceos y, entre otros, hay que destacar los producidos en los cultivos de arroz. Cualquier residuo vegetal puede ser transformado en azúcar y posteriormente ser convertido en bioetanol. Por otra parte, la celulosa no se considera para uso alimentario, por lo que la posibilidad de su aprovechamiento es amplia y es considerada una fuente óptima de materia prima para la producción de combustibles de forma sustentable. (Monroy Antonio*†, 2017)

La cascarilla de arroz constituye un residuo agrícola con bajo calor útil, por lo que, supone que su obtención sea de un coste muy bajo (Baxter, 2008). Estos residuos podrían ser utilizados como materia prima para la producción de bioetanol. Debido a la abundante generación y acumulación de cascarilla de arroz y a que generalmente los desechos de arroz se queman, siendo esta práctica las responsables de cierta contaminación del aire, han sido varias las investigaciones de aprovechamiento en ámbitos como la generación de biocombustibles. En vista de todo lo mencionado anteriormente, surgió la idea de utilizar la cascarilla de arroz como materia prima para la obtención de bioetanol. De manera que, dándole utilidad a estos residuos, se están planteando alternativas a su quema, con la consiguiente disminución en la contaminación del aire, así como amortizando su bajo coste como materia prima, además de que esta celulosa proviene del residuo de la siembra del arroz y con esto no se afecta a la seguridad alimentaria.

Tabla 2. Producción de cáscara de arroz en España

	2017/2018	2018/2019
Producción (t)	835.178	843.923

1.5 Biomasa

La biomasa se conoce como el conjunto de materia orgánica, de origen vegetal o animal, y los que proceden de su transformación natural o artificial. La Directiva 2009/28/CE relativa al fomento del uso de la energía procedente de fuentes renovables, define la biomasa como “la fracción biodegradable de los productos, desechos y residuos de origen biológico procedentes de actividades agrarias (incluidas las sustancias de origen vegetal y de origen animal), de la silvicultura y de las industrias conexas, incluidas la pesca y la acuicultura, así como la fracción biodegradable de los residuos industriales y municipales”. Es decir, la biomasa es un concepto muy amplio que incluye desde los residuos procedentes de las actividades forestales, agrícolas y ganaderas hasta la fracción orgánica de los residuos domésticos e industriales, pasando por los subproductos de las industrias agroalimentarias y de transformación de la madera.

1.6 Biomasa lignocelulósica

La biomasa lignocelulósica es una matriz compuesta principalmente por esterres extraíbles, proteínas, carbohidratos, celulosa, hemicelulosa, lignina y material mineral. Es un heteropolímero complejo y el componente estructural de las plantas. Se encuentra en residuos agrícolas, industriales, forestales, municipales, pastos de crecimiento rápido, material vegetal del mar, y biomasa proveniente de zonas semiáridas. La energía almacenada en sus componentes, hacen de la lignocelulosa un compuesto con un enorme potencial biotecnológico. La composición química de los materiales lignocelulósicos está constituida mayoritariamente por tres polímeros estructurales: la celulosa, la hemicelulosa y la lignina. En su estado nativo los materiales lignocelulósicos se encuentran asociados a otros componentes de naturaleza no estructural como fenoles, terpenos o alcaloides, entre otros que pueden llegar a suponer un porcentaje considerable en el peso de estos materiales, pudiendo así mismo llegar a tener una influencia significativa en los procesos de degradación. (Perales, 2015)

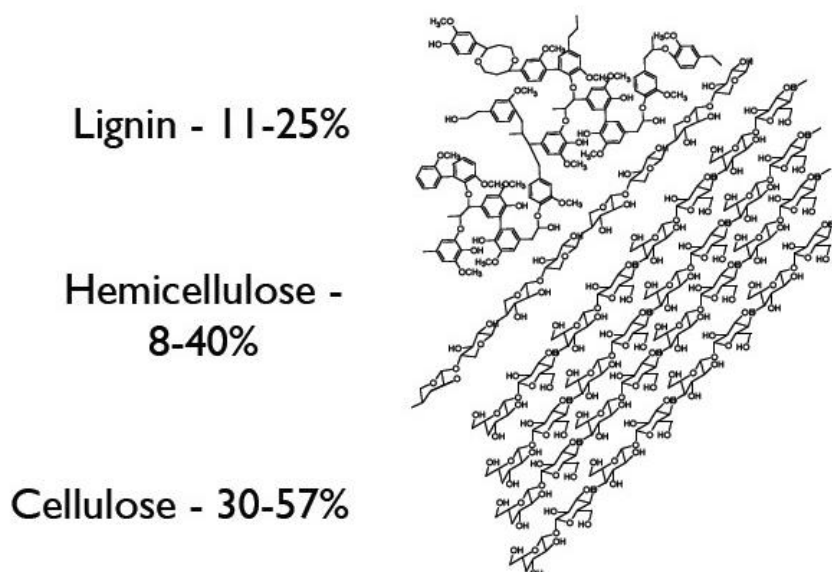


Ilustración 4. Estructura de la biomasa lignocelulósica

1.6.1 Celulosa

La celulosa se trata de un biopolímero lineal cuya unidad estructural es la celobiosa, que está compuesta por subunidades de D-glucosa unidas por un enlace glucosídico β 1-4. La celulosa en una planta se compone de piezas con una estructura cristalina. Las capas de celulosa se juntan y forman las llamadas brillas de celulosa o paquetes de celulosa, estas brillas de celulosa son en su mayoría independientes y débilmente unidos a través de enlaces de hidrógeno.

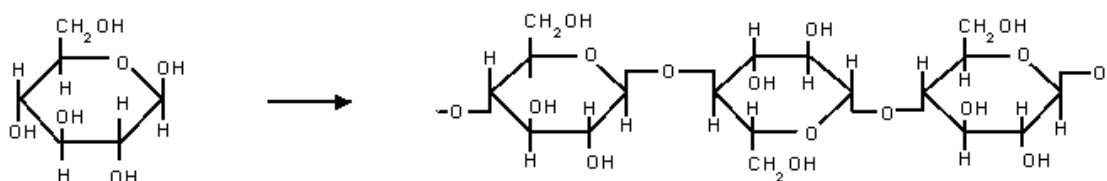


Ilustración 5. Estructura de la celulosa

Su estructura es altamente cristalina debido a la presencia de puentes de hidrógeno inter e intramoleculares que influyen en su morfología, rigidez, orientación, resistencia y reactividad. Las zonas de alta cristalinidad son difíciles de hidrolizar en sus unidades monoméricas, mientras que las zonas de menor cristalinidad, es decir amorfas, son accesibles y susceptibles a las reacciones químicas.

1.6.2 Hemicelulosa

Hemicelulosa es un término que se utiliza para designar a un grupo de heteropolisacáridos. Es un polímero formado principalmente por azúcares de cinco átomos de carbono (pentosas) como D-xilosa y L-arabinosa y de hexosas (azúcares de seis carbonos) como D-glucosa, D-manosa y D-galactosa, además contiene pequeñas cantidades de ácidos orgánicos.

La hemicelulosa está presente en la pared celular de las plantas y en ella forma un gel acuoso en el cual están embebidas las microfibrillas de celulosa [33]. Las cadenas de polisacáridos de la hemicelulosa cumplen el papel de suministrar la unión entre la celulosa y la lignina. La hemicelulosa puede ser dividida en dos grupos: celulosanos y poliurónidos.

Los celulosanos están formados por azúcares simples formando cadenas centrales de pentosas (xilosa y arabinosa) o de hexosas con ramificaciones cortas (manosa, galactosa y glucosa).

Las cadenas de hemicelulosa no son lineales, tienen ramificaciones laterales y no tienen una estructura regular, este polímero no es cristalino, por lo tanto, es fácilmente hidrolizado. Mientras que la celulosa siempre mantiene la misma estructura y composición, la de la hemicelulosa pueden variar ampliamente entre las especies de plantas. Esta presenta propiedades adhesivas, se hincha en el agua y el tamaño de sus cadenas es considerablemente más pequeño que el de la celulosa.

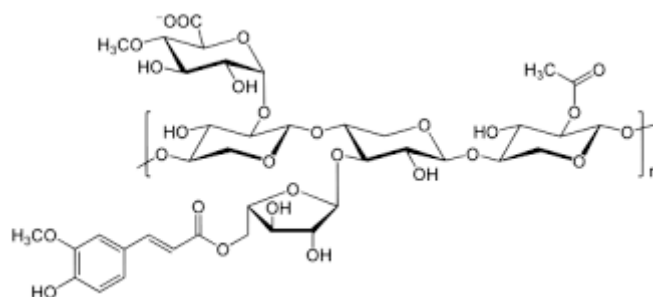


Ilustración 6. Estructura de la Hemicelulosa

1.6.3 Lignina

La lignina es un heteropolímero amorfo, tridimensional y ramificado formado por 3 alcoholes fenilpropiónicos (P-cumarínico, coniferílico y sinapílico) La unión entre los distintos monómeros se efectúa mediante enlaces carbono-carbono y enlaces tipo éter entre los anillos aromáticos, así como de los radicales de la misma. Su composición varía notoriamente de una especie vegetal a otra; está químicamente enlazada y al mismo tiempo entremezclada con la celulosa y la hemicelulosa, especialmente con esta última.

La lignina protege a la celulosa de diversos ataques y de la degradación natural de la planta (también representa una barrera que impide el acceso a la celulosa y su fácil aprovechamiento).

La lignina es la principal responsable de la rigidez en las paredes de las células vegetales y se acumula en la lámina media de esta donde su concentración puede llegar a ser del 75%; también puede llegar a ser una protección frente al ataque de gérmenes patógenos y agresiones mecánicas.

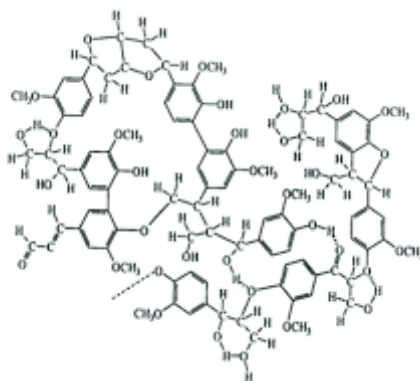
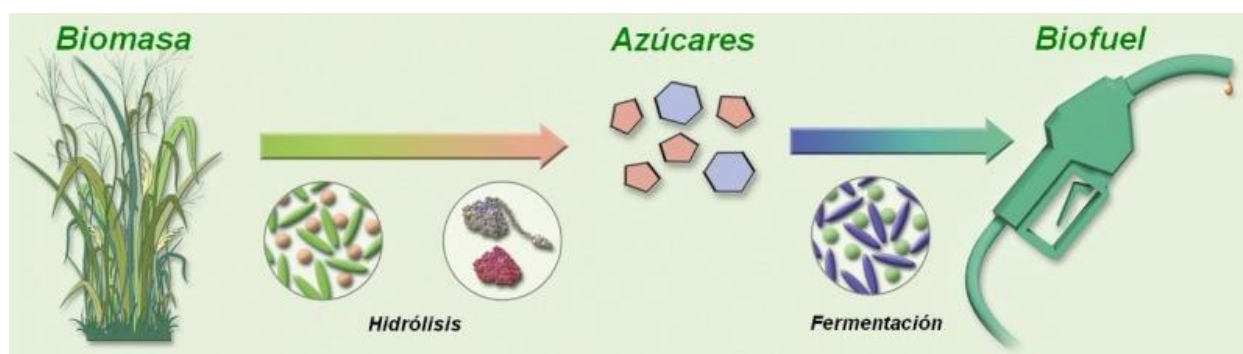


Ilustración 7. Estructura interna de la lignina

1.7 Obtención de bioetanol a partir de biomasa lignocelulósica

En general, la obtención de bioetanol a partir de materia lignocelulósica se puede resumir en tres etapas principales: la primera fase se trata de un pretratamiento de la biomasa que tiene como fin solubilizar la lignina y la hemicelulosa y reducir la cristalinidad de la celulosa. La segunda fase se trata de obtener glucosa a través de procesos, una hidrólisis ácida y una hidrólisis enzimática, la tercera etapa se trata de la fermentación de los azúcares mediante levaduras y la última es la obtención del bioetanol producido.



1.7.1 Pretratamiento

Es el primer proceso de transformación en el que se van a someter a los componentes principales de la materia lignocelulósica para así obtener una reducción del contenido de lignina en las paredes celulares y

así facilitar la liberación de la celulosa para su aprovechamiento en la fermentación. Además, también se pretende reducir la estructura cristalina de la celulosa y así aumentar el área superficial.

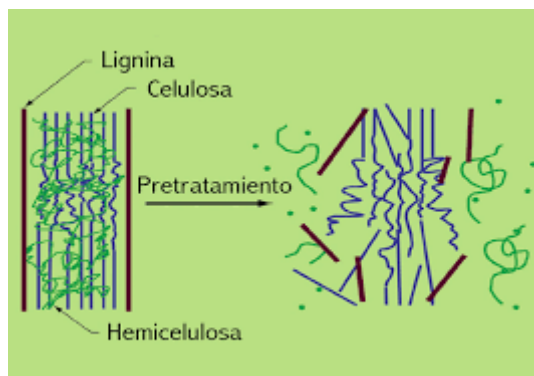


Ilustración 8. Efecto del pretratamiento en la materia lignocelulósica

Existen diversos procesos para el pretratamiento de materiales lignocelulósicos:

1.7.1.1 Pretratamientos físicos

Estos procesos tienen por objeto reducir el grado de polimerización de la celulosa y la lignina, así como de aumentar la superficie accesible para los enzimas. Suelen ser ineficaces y poco rentables, como la molienda, homogenización a alta presión, térmicos y ultrasónicos. La aplicación de pretratamientos físicos puede incrementar el rango de la hidrólisis e incrementar la biodegradabilidad anaeróbica de los sustratos, especialmente los residuos sólidos municipales.

1.7.1.2 Pretratamientos químicos

- **Pretratamientos en medio alcalino.** Los pretratamientos químicos en medios alcalinos se basan en el efecto de ruptura que algunas bases, como hidróxido de sodio (NaOH), potasio (K), calcio (Ca) y amonio (NH_4^+), tienen sobre la biomasa lignocelulósica, el cual depende del contenido de lignina en la biomasa, por lo tanto, aumenta la accesibilidad enzimática a la celulosa y hemicelulosa y aumenta el tamaño del poro lo que facilita la difusión de las enzimas hidrolíticas. Suelen llevarse a cabo con NaOH al 8-12% (p/p), en el rango de 80-120°C y durante 30-60 minutos. Presentan algunas desventajas como son las pérdidas inevitables de un 30 a un 35% de la materia seca inicial (Yiqing, 2012).
- **Pretratamientos con ácido diluido.** El pretratamiento consiste en sumergir el material lignocelulósico en ácido. Se puede utilizar ácido sulfúrico (H_2SO_4) o ácido clorhídrico (HCl) en concentraciones altas o diluidas para así romper las cadenas poliméricas; de las altas

concentraciones se puede decir que son eficaces para promover la hidrólisis de la celulosa, sin embargo el líquido obtenido luego del pretratamiento es tóxico, corrosivo y peligroso, por lo que será necesario contar con reactores que sean capaces de resistir la corrosión del proceso. Estos pretratamientos se llevan a cabo comúnmente con ácido sulfúrico diluido, en proporción del 1 al 3% con relación a la biomasa lignocelulósica seca. Las temperaturas y los tiempos de pretratamiento varían según las técnicas utilizadas (Fernandes, 2009). El objetivo de este pretratamiento es aumentar la superficie de la celulosa accesible a los enzimas, gracias a la extracción de la fracción hemicelulosa. Sin embargo, tienen poco efecto sobre el grado de cristalinidad de la celulosa.

1.7.1.3 Pretratamientos biológicos

Los principales organismos que descomponen la lignina pertenecen al grupo de los hongos. Estos degradan los polímeros de la madera, incluyendo los componentes de la lignina, mediante la secreción de enzimas extracelulares. Las ventajas de la deslignificación biológica sobre otros métodos incluyen las leves condiciones de reacción, mayor rendimiento por producto y pocas reacciones laterales, menor demanda de energía y menor resistencia en el reactor a la presión y la corrosión. Sin embargo, la velocidad de hidrólisis en la mayoría de los procesos de pretratamiento biológico es muy baja y la dificultad de controlar las condiciones de operación hace que no se conozcan ensayos a una escala superior al nivel de laboratorio (Abril, 2012).

1.7.2 Hidrólisis

Para la conversión de celulosa a glucosa es necesario que se lleve a cabo un proceso de hidrólisis. En este proceso se realiza la descomposición y ruptura de las moléculas de la celulosa y la hemicelulosa, convirtiéndolos así en moléculas de glucosa. Existen dos técnicas para hidrolizar la materia:

1.7.2.1 Hidrólisis química

La hidrólisis química consiste en exponer el material lignocelulósico a una sustancia química por un periodo de tiempo a una temperatura específica, obteniendo monómeros de azúcar provenientes de la celulosa y polímeros provenientes de la hemicelulosa. La hidrólisis química puede llevarse a cabo en presencia de reactivos ácidos o alcalinos, sin embargo, es más común el uso de ácido en este proceso. Existen dos formas de realizar la hidrólisis ácida, con ácido diluido o concentrado.

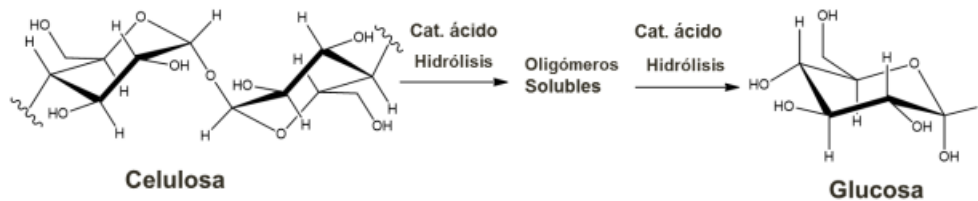


Ilustración 9. Proceso de hidrólisis ácida sobre celulosa

- **Hidrolisis con ácido diluido:** este proceso es llevado a cabo a temperaturas y presiones altas, con tiempos de reacción cortos que van desde segundos hasta algunos minutos, lo cual facilita un proceso continuo. La solución utilizada comúnmente es ácido sulfúrico (H_2SO_4) al 1% p/p a temperaturas de alrededor de 488 K. La mayoría de estos procesos presentan una eficiencia del 50% [46].

Este proceso es llevado en dos etapas para tomar ventaja de las diferencias entre la celulosa y la hemicelulosa. La primera etapa se desarrolla a baja temperatura para maximizar la producción de la hemicelulosa para obtener pentosas y hexosas de la celulosa amorfa y una segunda etapa a alta temperatura para hidrolizar la celulosa y obtener hexosas.

- **Hidrolisis con ácido concentrado:** para este tipo de hidrólisis se utiliza una concentración de ácido en el intervalo de 10 a 30% p/p y los tiempos de reacción son normalmente más largos que en los procesos de hidrolisis con ácido diluido, presentando una completa y rápida conversión de la celulosa en glucosa y de la hemicelulosa en pentosas con una baja degradación de dichos azúcares. Este procedimiento no es económicamente viable debido a la necesidad de equipos capaces de resistir la alta corrosión y de requerir un proceso de reciclaje del ácido para disminuir los costos. (Mustafat, 2011)

La hidrólisis ácida de la lignocelulosa se realiza en dos etapas. La primera etapa es donde la hemicelulosa se hidroliza con la ayuda de ácido diluido y en la segunda etapa, la celulosa se hidroliza usando ácido concentrado

1.7.2.2 Hidrólisis enzimática

La sacarificación de la celulosa se lleva a cabo enzimáticamente mediante celulasas, las cuales producen la ruptura de las cadenas poliméricas de la celulosa y la hemicelulosa. A partir de la celulosa se obtiene glucosa, mientras que a partir de la hemicelulosa se obtienen diferentes monosacáridos, tal como xilosa, glucosa, arabinosa, galactosa y manosa, entre otros. La principal ventaja de la hidrólisis enzimática sobre la química es que la enzimática no presenta problemas de corrosión. La hidrólisis enzimática es un método

específico, realizado en condiciones relativamente suaves (50°C), que permite rendimientos de hidrólisis superiores a los obtenidos por vía química.

El procedimiento más común consiste en poner en contacto la disolución de enzima con la muestra del sustrato lignocelulósico previamente pretratado, manteniendo el pH, la temperatura y la homogeneidad de la mezcla durante todo el proceso. Una vez determinadas las condiciones óptimas de pH y temperatura, las posibilidades de optimización son bastante limitadas.

Los factores que afectan la hidrólisis enzimática de la celulosa incluyen: el tipo de sustrato, la actividad celulasa y las condiciones de reacción: temperatura y pH (Parameswaran Binod, 2011).

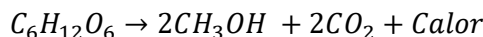
El mecanismo de la hidrólisis de la biomasa lignocelulósica a glucosa ocurre en tres pasos :

- El primer paso es la unión del enlace β -1,4 de la celulosa con la molécula de agua catalizada por la endoglucanasa (1,4- β -D-glucanohidrolasa) dando como resultado la formación de celodextrina de cadena más corta y extremos de cadena libre. (extremos reductores y no reductores).
- El segundo paso es la degradación de la celodextrina a glucosas de dos unidades (celobiosis) con la ayuda de exoglucanasa (1,4- β -D-glucano celobiohidrolasa) ajustando las cadenas reductoras y no reductoras.
- El tercer paso es la formación de glucosa obtenida cuando las β -glucosidasas golpean las celobiosis.

La producción de glucosa es necesaria porque el proceso posterior que es la fermentación requiere el uso del monómero más simple como materia prima.

1.7.3 Procesos de fermentación

Cuando la celulosa se haya transformado en una solución azucarada, se somete ésta a un proceso de fermentación, para convertir los azúcares en etanol por la acción de microorganismos. Esta transformación se produce por una compleja secuencia de reacciones que se puede expresar como:



Esta reacción se lleva a cabo principalmente mediante el uso de levaduras y bacterias. A nivel industrial las levaduras son más utilizadas. La especie de levadura utilizada con más frecuencia es la *Saccharomyces cerevisiae* y la bacteria *Zymomonas mobilis*. Estos dos microorganismos son capaces de fermentar glucosa en etanol, sin embargo, no tienen la capacidad de fermentar xilosa.

Para la selección óptima de microorganismos debe considerarse que presenten altas conversiones, tolerancia alcohólica y un rango amplio de sustratos utilizables. (Picataggio, 1994)

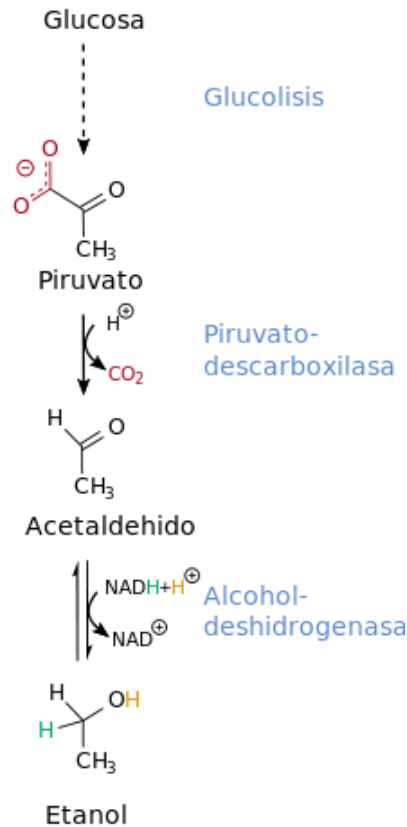


Ilustración 10. Reacción de la fermentación alcohólica

Las tecnologías utilizadas para la fermentación de unidades monomérica de azúcar en etanol incluyen:

- **Fermentación por lotes.** Es el más simple de los procesos de fermentación, ya que es flexible para una gama de productos, fácil de controlar y tiene múltiples recipientes. El proceso consiste en agregar los sustratos, microorganismo, medio de cultivo y nutrientes al inicio de la operación en un sistema cerrado en condiciones favorables en un tiempo predeterminado. Los productos son retirados tras el tiempo de fermentación. Los problemas con este tipo de proceso de fermentación son el bajo rendimiento, el largo tiempo de fermentación, el alto costo de mano de obra y una posible inhibición del sustrato debido a las altas concentraciones de azúcar.
- **Fermentación continua.** Este proceso consiste en añadir sustratos, medios de cultivo y nutrientes a un fermentador que contiene microorganismos activos y retirar los productos de forma continua. Las ventajas de este proceso son la alta productividad, los pequeños volúmenes de fermentación y los bajos costos operativos y de inversión. Las desventajas incluyen la posibilidad de contaminación del producto y la posible disminución de la capacidad de la levadura para apoyar la producción de etanol debido al largo tiempo de cultivo.

- **Fermentación discontinua alimentada.** Se trata de la combinación de los dos procesos anteriores. En comparación con otros procesos de fermentación, este proceso tiene una mayor productividad, más oxígeno disuelto en el medio, un tiempo de fermentación más corto y un efecto tóxico más bajo del medio. La desventaja es que la productividad del etanol está limitada por la concentración de masa celular y la tasa de alimentación.
- **Hidrólisis y fermentación separadas (SHF).** La hidrólisis enzimática se separa de la fermentación, lo que permite que las enzimas funcionen a alta temperatura y que los microorganismos de la fermentación funcionen a temperatura moderada para un rendimiento óptimo. Con este proceso se espera que la productividad del etanol sea alta. Sus desventajas son el alto costo de capital, el requisito de un tiempo de reacción alto y la posibilidad de limitar las actividades de celulasa por los azúcares liberados durante el paso de hidrólisis.
- **Sacarificación y fermentación simultáneas (SSF).** Aquí la sacarificación de la celulosa y la fermentación de azúcares monoméricos se llevan a cabo en el mismo reactor simultáneamente. Dado que el hidrolizado se usa simultáneamente para la fermentación, se puede evitar la inhibición habitual de las actividades de la celulasa. La desventaja de SSF es la variación en la temperatura óptima requerida para el desempeño eficiente de la celulasa y los microorganismos durante la hidrólisis y la fermentación, respectivamente.
- **Sacarificación y cofermentación simultáneas (SSCF).** Se trata de realizar la hidrólisis y sacarificación en la misma unidad con la cofermentación de azúcares pentosas. Al igual que SSF, SSCF tiene las ventajas de un menor costo, un mayor rendimiento de etanol y un tiempo de procesamiento más corto. Además, SSCF ayuda a minimizar la inhibición y aumenta la relación de concentración de xilosa a glucosa.
- **Bioprocesamiento consolidado (CBP).** Esto requiere que la producción de enzimas, la hidrólisis y la fermentación se realicen en una sola unidad. Si bien CBP aún se encuentra en su etapa inicial, se han identificado las siguientes ventajas: menor consumo de energía, menor costo de enzima, menor costo de inversión, menor posibilidad de contaminación. (Edeh, 2021)

Los parámetros que afectan el rendimiento de la fermentación y por lo tanto deben estar bajo control son: la temperatura, el pH, tasa de crecimiento y la tolerancia de la levadura frente al alcohol y a los inhibidores. La fermentación alcohólica, en su proceso discontinuo, puede durar entre 2 y 3 días, después de los cuales se retira la masa fermentada para su destilación.

1.7.4 Destilación

Se trata del último proceso que se realiza con el fin de generar bioetanol, en este proceso se realiza la separación de la mezcla resultante de los anteriores procesos, la mezcla líquida está conformado por agua

y bioetanol. En este proceso existen tres técnicas para realizar la división de las sustancias: la extracción líquido-líquido pues consiste en mantener el etanol en un estado orgánico para aumentar la concentración, la segunda técnica es destilación azeotrópica y por último destilación extractiva.

El proceso más usado a escala industrial es destilación extractiva debido a que no requiere de mucho consumo energético, esta técnica se fundamenta en el uso de un disolvente que es capaz de separar las sustancias de la mezcla teniendo en cuenta la solubilidad del disolvente y los diferentes puntos de ebullición, modificando la volatilidad del producto principal sin la creación de otra sustancia que puedan intervenir en el proceso. Actualmente la sal más utilizada para la ejecución de la destilación extractiva es el cloruro de calcio como agente de separación puesto que sus costos de inversión son menores a otras sales. (Cristancho, 2020)

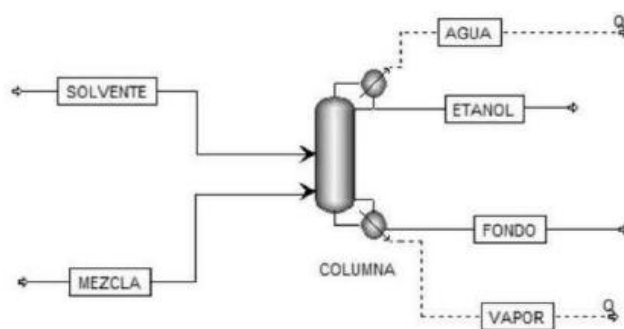


Ilustración 11. Esquema del proceso de destilación extractiva

1.8 Productos

Los productos de las biorrefinerías se pueden dividir en dos grandes grupos, por un lado, los destinados a la producción de energía como son los biocombustibles, el calor y la electricidad y por otro lado los utilizados como materias para la sociedad y la industria. Esta diversidad es la que permite la rentabilidad de las biorrefinerías.

1.8.1 Productos obtenidos de la celulosa

El principal producto de la celulosa es el bioetanol indistintamente de ser de primera o segunda generación, se obtiene de la fermentación de los azúcares de la biomasa.

Por otro lado, también se está contribuyendo al desarrollo de los biopolímeros ya que pueden ser un gran sustituto de los plásticos procedentes de los recursos fósiles.

Finalmente, otro de los productos generados a partir de la celulosa es el papel. Este se obtiene al añadir sustancias como polipropileno o polietileno a la pulpa de la celulosa, consiguiendo así un producto de iguales características.

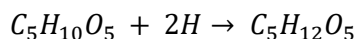
1.8.2 Productos de la lignina

La lignina es empleada principalmente como combustible para la generación de energía. Esta energía puede ser utilizada en la propia instalación para llevar a cabo los procesos o destinarla para usos específicos como pueden ser determinadas industrias o la red eléctrica de un país.

También se emplean para la fabricación de adhesivos y LigMed. Este último es un medicamento animal de coste medio que en un futuro podría llegar a sustituir al equivalente sintético.

1.8.3 Productos Hemicelulosa

La hidrólisis de la hemicelulosa da lugar a azúcares C5 y C6, entre ellos podemos destacar la xilosa, la cual mediante la siguiente reacción se produce el xilitol. El cual es un endulzante para los diabéticos.



Otra opción es la obtención de productos furanos directamente de la xilosa. De estos productos furanos se pueden obtener el Nylon 6, productos químicos y resinas furaneas.

Finalmente, de los azúcares C5 obtenidos de la hidrólisis se puede obtener el bioetanol. (Vázquez, 2017)

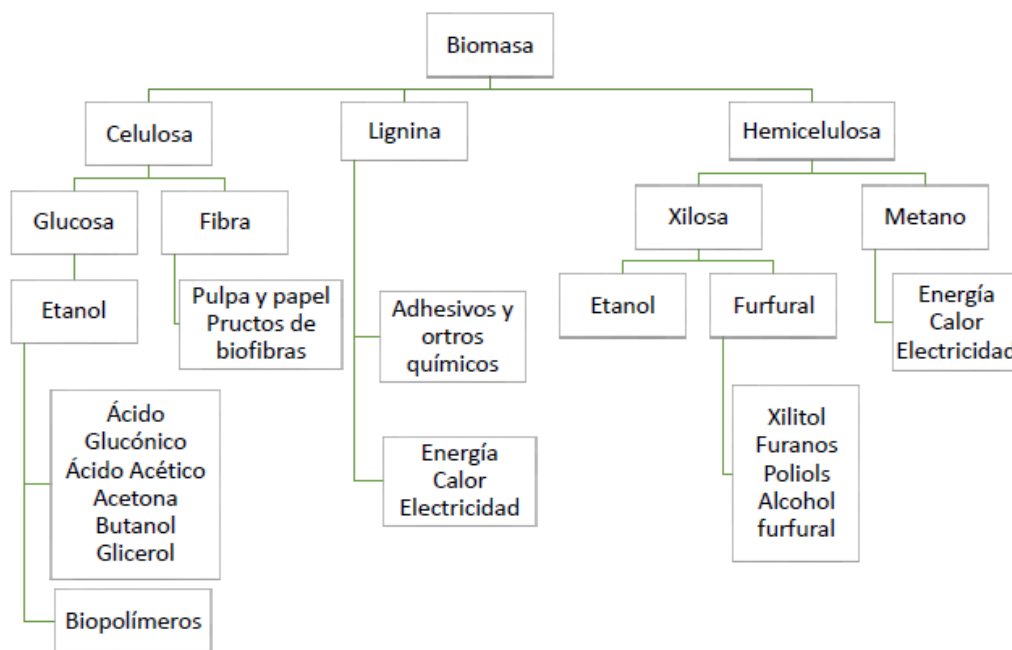


Ilustración 12. Productos y subproductos obtenidos de la producción de bioetanol a partir de masa lignocelulósica

2 Objetivos

El principal objetivo de este Trabajo de Final de Grado es el diseño de un proceso de producción de bioetanol a partir de materia lignocelulósica. Para ello, se han de cumplir los siguientes objetivos específicos:

- Selección del microorganismo y las condiciones de trabajo.
- Selección del tipo de reactor y el modo de operación.
- Descripción y diseño de las etapas de purificación.
- Escalado del proceso.
- Dimensionado del proceso.
- Estudio de viabilidad económica.

Este trabajo de fin de grado está alineado con los siguientes objetivos de desarrollo sostenible (ODS):

- Objetivo 12: Garantizar modalidades de consumo y producción sostenibles. Este objetivo se ha ligado al presente trabajo, ya que en el proyecto lo que se ha realizado es crear una producción a través del consumo de un desperdicio agrónomo, como es la cáscara de arroz.
- Objetivo 13: Adoptar medidas urgentes para combatir el cambio climático y sus efectos. Sabemos que este objetivo es cumplido, ya que se trata de una producción sostenible y de carácter bío, además de que los desechos de la producción son tratados, también pueden ser utilizados como productos de otros sectores.

3 Metodología

3.1 Descripción del microorganismo elegido y las condiciones de trabajo

Como se ha mencionado anteriormente, el objetivo principal de este Trabajo Final de Grado es el desarrollo o diseño de un proceso de producción de bioetanol a través de la biomasa lignocelulósica y ver su rentabilidad. Para esto, es necesario primero definir el proceso, teniendo claro el punto de inicio y el punto final, a qué condiciones se van a trabajar y que fuentes de carbono, nitrógeno, microorganismos y demás, se van a utilizar.

Con el fin de definir el mejor proceso posible, se buscaron en bibliografía gran cantidad de artículos en los que estudiaran un proceso para obtener bioetanol y comparar los rendimientos obtenidos con el fin de seleccionar y desarrollar el que mayor cantidad obtuviera al final.

Se encontró un capítulo de un libro (Edeh, 2021) en el que se discuten los rendimientos obtenidos por diferentes cepas de levaduras en el proceso de fermentación para la obtención de bioetanol, por lo que la mayoría del diseño del proceso de fermentación se basará en los resultados obtenidos en el artículo mencionado. A su vez también se ha encontrado otro artículo (I. del Campo *, 2006) en el que se ha tomado como referencia para obtener los valores de rendimiento del proceso de hidrólisis y sus condiciones de trabajo.

El proceso para seguir básicamente se ha explicado anteriormente. A partir de una fuente de carbono, en este caso la glucosa presente en los residuos de cáscara de arroz se va a acabar produciendo bioetanol de segunda generación.

Inicialmente, se debe seleccionar el microorganismo que se va a utilizar. El microorganismo seleccionado pertenece a la cepa de levaduras *Saccharomyces cerevisiae*, más concretamente el modelo 3013

La *Saccharomyces cerevisiae* ha sido utilizada ampliamente en procesos industriales porque ha demostrado ser un microorganismo muy robusto y adecuado para la fermentación de hidrolizados lignocelulósicos, a pesar de que esta levadura no es capaz de fermentar las xilosas. El rendimiento en la producción de etanol y una notable tolerancia al etanol son dos de las principales características que hacen especial a esta levadura para este proceso; estas propiedades inusuales son el resultado de la adaptación a la producción de etanol a partir de hexosas durante miles de años (Mustafat, 2011).

A escala de planta piloto consiguen obtener el siguiente rendimiento fijando unas condiciones de trabajo, las cuales serán la que se usarán para el diseño del fermentador.

Tabla 3. Rendimiento obtenido y condiciones de trabajos con el microorganismo seleccionado

Microorganismo	Temperatura (°C)	pH	Tiempo de fermentación (h)	Concentración de azúcar (g/L)	Rendimiento de etanol (g/L)
<i>Saccharomyces cerevisiae 3013</i>	30	5.5	48	280	130.12

La concentración del inóculo no tiene ningún efecto significativo sobre la producción de etanol, pero sí sobre la tasa de consumo de etanol y el rendimiento de azúcar. Cuando hay un aumento en el número de células de 1×10^4 a 1×10^7 células por ml, también se observa una mayor producción de etanol. Se ha informado que cuando la concentración de inóculo supera las 10^7 y 10^8 células por ml, no se observa ningún efecto significativo en la producción de etanol. A la concentración elevada de inóculo, se observa una reducción del tiempo de fermentación ya que hay un rápido crecimiento celular. (Mohammad Moneruzzaman Khandaker, 2021)

La producción de bioetanol mediante un bioproceso se realiza en la gran mayoría de los casos en discontinuo. Un cultivo que se lleva a cabo de forma discontinua, Batch o por lotes, se caracteriza por tener paradas, es decir, a diferencia de un proceso continuo que se va alimentando y vaciando continuamente, un proceso discontinuo tanto para alimentarlo como para vaciarlo, el proceso debe interrumpirse. Cuando se trabaja de esta forma, se suele tener más de 1 equipo de proceso ya que durante la carga y descarga de uno de ellos, el otro o los otros pueden seguir trabajando, evitando así las pérdidas de tiempo excesivas o también se usan más de uno en caso de avería no parar toda la producción.

3.2 Materias primas

Dado que el proceso que se lleva a cabo para obtener el bioetanol se trata de una fermentación alcohólica necesita para poder funcionar fuentes de carbono, fuentes de nitrógeno, fosfatos y minerales, ya que esto es lo que permitirá al microorganismo seleccionado transformar la glucosa en bioetanol. Las materias primas utilizadas durante el desarrollo del proceso y para procesos paralelos como la hidrólisis ácida se detallan a continuación:

3.2.1 Fuente de carbono

En el proceso de fermentación, se va a utilizar la glucosa como fuente de carbono. La glucosa es la principal fuente de energía para el correcto desempeño de las tareas biológicas de los seres vivos. La glucosa está presente en la mayoría de las frutas y en muchos vegetales. Es abundante como polímero de reserva en los animales (glucógeno) y en las plantas (almidón). La mayor parte de la glucosa está presente como polímero no digestible (celulosa). Es un producto un tanto caro si se va a utilizar directamente como fuente de carbono. Es por esto por lo que en este proceso se va a adquirir de forma indirecta, a partir de los residuos agrícolas en la producción del grano de arroz, es decir de la cáscara de arroz. La cáscara de arroz es un desecho de la industria de agroalimentaria, ya que normalmente a estas industrias solo les interesa el grano de arroz que se encuentra en su interior, es por esto que por un precio muy bajo se puede conseguir una gran cantidad. La cáscara de arroz presenta los porcentajes presentados en la Tabla 4 (Valverde, 2007)

Tabla 4. Porcentajes de material lignocelulósico en la cáscara de arroz

Material lignocelulósico	% de celulosa	% de Hemicelulosa	% de lignina
Cáscara de arroz	39.05	18.1 – 21.35	22.80

Y con la celulosa y la hemicelulosa mediante un proceso de hidrólisis ácida se puede conseguir glucosa, por lo que, de este modo partiendo de cáscara de arroz se va a obtener la glucosa necesaria para el proceso.

3.2.2 Fuente de nutrición

3.2.2.1 Nitrógeno

Después de la glucosa y la fructosa, el nitrógeno es el factor nutricional más importante para la levadura. Se utiliza en la síntesis de varias moléculas, principalmente proteínas estructurales, enzimas y proteínas transportadoras. Sin duda, la disponibilidad de nitrógeno es uno de los factores de crecimiento cruciales para estimular la multiplicación de la levadura y garantizar un metabolismo fermentativo eficaz. *Saccharomyces cerevisiae* solo puede asimilar formas simples de nitrógeno como amonio, aminoácidos y péptidos pequeños que contienen de dos a cinco aminoácidos. La levadura absorbe estos compuestos a diferentes velocidades y cantidades, según una escala de preferencia: el amonio se consume más rápido que los aminoácidos, algunos aminoácidos se asimilan completamente y otros no. Por esta

razón, con el término NFA (Nitrógeno Fácilmente Asimilable por la levadura), nos referimos a aquellos compuestos que efectivamente la levadura puede utilizar. Las necesidades de NFA varían en función de:

- La cepa de levadura.
- Contenido de azúcar en el mosto: cuanto mayor es el contenido de azúcar, mayor es la necesidad de NFA.
- Cantidad de biomasa: cuanto mayor es la población de levaduras, mayor es la demanda de NFA.

Las concentraciones de NFA en el mosto varían y, a menudo, son escasas y no son suficientes para satisfacer los requisitos nutricionales de la levadura. Muchos autores estiman que el contenido mínimo de NFA necesario para una fermentación completa es de alrededor de 150 mg/L de NFA en un mosto que contiene 200 g/L de azúcares.

En este trabajo se van a utilizar como fuente de nitrógeno 3 compuestos polipeptona. Cada compuesto representará un porcentaje del total de fuente de nitrógeno introducido al medio. La cantidad polipeptona que se utilizará será 10g/L (Hairui Ji, 2012)

3.2.2.2 Fósforo

El fósforo es utilizado como una de las fuentes principales de energía utilizadas por las células al realizar sus actividades, ya que este forma parte de la molécula ATP (trifosfato de adenosina) y esta es la molécula portadora de la energía primaria de todas las formas de vida.

Las fuentes de fosfatos más generalizadas a nivel industrial son $(NH_4)_2HPO_4$, Na_2HPO_4 , NaH_2PO_4 , Na_3PO_4 , y por último KH_2PO_4 .

Según bibliografía, como fuente de fósforo se va a utilizar KH_2PO_4 , en una cantidad de 1g/L. (Hairui Ji, 2012)

3.2.2.3 Vitaminas

Las vitaminas también son necesarias para la nutrición de las levaduras, podemos destacar las vitaminas biotina, colina, ácido pantoténico, riboflavina, tiamina.

En este caso como nutrición de la levadura se va a utilizar sulfato de magnesio y sulfato de zinc, en cantidades de 2 y g/L respectivamente

3.2.3 Ácido sulfúrico

Anteriormente se ha explicado que la glucosa a utilizar provendrá de la transformación de celulosa contenida en las cáscaras de arroz, para ello, se ha de realizar un proceso de hidrólisis ácida. La hidrólisis ácida de la lignocelulosa se realiza en dos etapas. La primera etapa es donde la hemicelulosa se hidroliza con la ayuda de ácido diluido y en la segunda etapa, la celulosa se hidroliza usando ácido concentrado.

3.2.4 Hidróxido de sodio

El ácido sulfúrico utilizado, debe ser neutralizado, puesto que en el proceso posterior a la hidrólisis, es decir la fermentación, afectaría al *pH* del medio, afectando negativamente al rendimiento y muy posiblemente matando los microorganismos encargados de la producción. Se utilizará *NaOH* sólido para neutralizar el ácido. Hay que tener en cuenta a la hora de los cálculos que el ácido sulfúrico es diprótico, es decir tiene 2 protones mientras que el hidróxido de sodio solo tiene 1 molécula de OH^- .

3.3 Descripción del proceso de obtención de bioetanol a partir de cáscara de arroz

Principalmente el proceso de obtención de bioetanol a partir de la masa Lina celulósica que está presente en la cáscara de arroz se puede dividir en cuatro etapas principales:

- Pretratamiento
- Hidrólisis
- Fermentación
- Destilación

A continuación, en este apartado se van a describir los pasos del proceso y se van a detallar las características de cada una de sus partes.

3.3.1 Obtención y preparación de la materia prima

La cáscara de arroz utilizada en este trabajo de fin de grado puede ser obtenida de cualquier cultivo de arroz presente en España. Los principales cultivos se encuentran en las marismas del Guadalquivir, las vegas del Guadiana, el Delta del Ebro y en las marismas de la Comunidad Valenciana. (Iberf, 2020)

Inicialmente, tras adquirir la cáscara de arroz hay que someterla a un proceso de lavado, filtrado y de secado, con esta última se consigue la reducción de la humedad de la materia prima, consiguiendo así un mayor rendimiento en la producción de bioetanol.

3.3.2 *Pretratamiento*

Después del acondicionamiento de la materia prima, esta es sometida a un proceso de pretratamiento con agua líquida caliente (LHW), ya que este resulta la opción más viable para el proceso con cascarilla de arroz, el cual es un proceso que alcanza un rendimiento de obtención de la celulosa de un 85%.

el proceso con agua líquida caliente usa agua elevadas temperaturas y presiones para mantener su fase líquida y así promover la separación y remoción de la matriz de lignina.

las condiciones de trabajo se resumen en la Tabla 5.

Tabla 5. Condiciones de trabajo para el proceso de pretratamiento

Pretratamiento cascara de arroz	Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Presión (MPa)	Rendimiento celulosa	Rendimiento hemicelulosa y lignina
	150	20	0.35	85%	35-60%

3.3.3 *Hidrólisis ácida*

La lección de la hidrólisis ácida es de vida, aunque el proceso de hidrólisis se lleva a cabo de manera independiente a la de fermentación por lo que la hidrólisis ácida es una de las mejores opciones.

En este proceso el ácido hidroliza la biomasa hacia los azúcares fermentables. para este tipo de procesos es necesario añadir etapas del lavado y detoxificación para poder remover el ácido remanente. Además, hay que considerar las condiciones tóxicas y corrosivas de los ácidos.

debido al ahorro en reactivos y al mantenimiento de los equipos se va a hacer uso de ácido diluido. las condiciones de trabajo se ven representadas en la Tabla 6.

Tabla 6. Condiciones de trabajo para el proceso de hidrólisis ácida

Reactivo	concentración	Temperatura (°C)	Presión (atm)	Tiempo (min)	Rendimiento de glucosa
H ₂ SO ₄	1 % (p/p)	170	5	10	40.61

3.3.4 Fermentación

Anteriormente, se ha discutido el uso del microorganismo para el proceso de fermentación. Se ha optado por utilizar una levadura cuya cepa se trata de *Saccharomyces cerevisiae*, este se trata de uno de los microorganismos más utilizados a nivel industrial. Las Condiciones de trabajo del proceso de fermentación están detalladas en la Tabla 3.

Hay que destacar que antes de llevar a cabo el proceso de fermentación se debe activar la levadura 15 minutos antes del inicio del proceso de fermentación.

3.3.5 Separación y deshidratación

Unido al alto desarrollo, bajo consumo energético y a que es muy respetuoso con el medio ambiente, se decidió utilizar un proceso de separación por tamices moleculares.

Los tamices moleculares son sustancias granulares de forma cilíndrica o esférica, fabricados a partir de aluminosilicatos de potasio, el tamiz más usado en este tipo de proceso es el de zeolita A3. Para la deshidratación del etanol se usan tamices con un diámetro promedio de 3 Angstroms, la molécula de agua tiene un diámetro menor que los caminos intersticiales de este tipo de tamices mientras que la del etanol no. Las moléculas de agua invaden la estructura interior de los tamices a diferencia de las moléculas de etanol que, debido a su mayor tamaño, pasan a través del espacio entre las partículas de los tamices y abandonan el lecho sin absorberse.

Una vez saturado el lecho del absorbente con la sustancia a separar se debe realizar la liberación de mismo por un proceso de desorción para reutilizar el material absorbente, para la regeneración del tamiz se requiere gas caliente, el más económico y fácil de manejar es el CO₂. El equilibrio agua-etanol es alterado por la presencia del tamiz lo que permite superar el punto azeotrópico. La alteración del equilibrio debido a los

tamices moleculares se debe al efecto del campo de fuerza ejercido por el tamiz sobre los componentes de la mezcla. Los vapores que provienen de la desorción son eliminados al ambiente por un desgasificador. Mientras se regenera el material desecante del tamiz se cierran las válvulas del proceso y se abren las de regeneración que están ubicadas en la línea de tubería que llega al tanque de CO_2 .

A nivel industrial se usan varias columnas de absorción, mientras una se regenera las otras siguen la producción. (Arellano Pérez Alberto Israel, 2014)

Este sistema se encuentra compuesto por cuatro columnas, las dos primeras columnas se tratan de columnas de destilación y por último, las columnas de tamices moleculares que están compuestas por dos columnas, la primera se trata de una columna de absorción y la segunda una columna de regeneración. Las condiciones de trabajo se encuentran detalladas en la Tabla 7

Tabla 7. Condiciones de trabajo del proceso de separación

Equipo	Columna de destilación	Columna de destilación	Columna de adsorción	Columna de regeneración
Temperatura (°C)	70	78	116	116
presión (atm)	1	1	2	0,14
Rendimiento % (p/p)	90%	90 %	99,5%	

La descripción del proceso ha sido basada principalmente en un trabajo (Juan Nicolás Muñoz, 2021) en el que se han comparado todos los procesos para la obtención de etanol a partir de la cáscara de arroz y a partir de estas comparaciones se han obtenido los mejores procesos para conseguir el mayor rendimiento de etanol.

3.4 Descripción del equipo y escalado

A continuación, se va a especificar el equipo utilizado y el escalado que se ha realizado para llevar el proceso de producción a gran escala.

3.4.1 *Pretratamiento de la cáscara de arroz.*

Para el proceso de pretratamiento, puesto que se habrá en 2 tanques diferentes por motivos de seguridad, se necesitarán 2 tanques calefactados de 51 m^3 cada uno, los cálculos de los volúmenes de los tanques se detallarán en su sección de cálculos. Además, hay que remarcar que se necesitarán a la entrada un intercambiador de calor para alcanzar la temperatura de trabajo y también serán necesarios dos separadores para extraer la lignina y que la celulosa liberada continúe al siguiente proceso.



Ilustración 13. Tanque de pretratamiento

3.4.2 *Hidrólisis ácida*

Para la hidrólisis ácida, puesto que se habrá en 2 tanques diferentes al igual que en el caso anterior, por motivos de seguridad, se necesitarán 2 tanques calefactados de 22 m^3 cada uno, los cálculos de los volúmenes de los tanques se detallarán en su sección de cálculos. Además, hay que remarcar que se necesitarán a la entrada un intercambiador de calor para alcanzar la temperatura de trabajo y también serán necesarios dos evaporadores que eliminen parte del agua de la disolución para concentrar la glucosa antes de introducirla en el fermentador.



Ilustración 14. Tanque de hidrólisis ácida

3.4.3 Fermentador

Para una de las operaciones principales del proceso serán necesarios dos fermentadores cónicos refrigerados de unos 7500 litros, cálculos detallados en su sección, y con control de temperatura. Si no se encuentran refrigerados, se procederá a la utilización de un intercambiador de calor para disipar el posible calor excesivo de la reacción.



Ilustración 15. Fermentador

3.4.4 Purificación del producto

Para la purificación del etanol, se van a necesitar cuatro columnas dos de destilación de 7 metros de altura y dos columnas de adsorción de tamices moleculares de 0.4 metros de altura, cuyos cálculos están detallados en su sección. Hay que remarcar que en las columnas de absorción cuando una se satura a los 30 minutos

se utiliza la otra, y para desorber la columna que ya está saturada se va a utilizar una corriente de dióxido de carbono que se ha producido en el proceso de fermentación.



Ilustración 16. Columna de destilación

3.4.5 Sistemas de control.

Hay que tener en cuenta que para el correcto funcionamiento del proceso se tiene que realizar bajo varias condiciones de trabajo. Estas condiciones tienen que estar controladas en todo momento, para que si cambian se actúe en consecuencia y que no afecte a la producción. Para ello se debe tener en cuenta la presencia de un sistema de control que controle las temperaturas de trabajo de cada proceso, el pH del proceso del fermentador, el caudal del proceso, la presión del sistema y el nivel de líquido de los reactores y de los tanques. Para ello se realizará toda esta actividad mediante controladores PID.

3.5 Descripción del estudio económico

Una vez finalizados los cálculos, teniendo todas las cantidades de materias primas y equipos necesarios, se procederá a realizar un análisis económico del proceso y ver si es viable o no llevarlo a cabo. Se va a realizar un análisis de rentabilidad calculando el *VAN*, el *TIR* y el *Pay-Back*. Para poder realizar el cálculo de estos parámetros, primero se deben calcular el presupuesto de inversión y el presupuesto de explotación:

3.5.1 Presupuesto de inversión

El presupuesto de inversión se trata de una operación donde se reflejan todas las inversiones de financiación a corto plazo, es decir se trata de las sumas de los costos de toda la maquinaria, el equipo y el terreno

necesarios para el comienzo y desarrollo del proceso. Estos valores se han obtenido en base a equipos similares a través de catálogos y páginas de venta online.

3.5.2 *Presupuesto de explotación.*

El presupuesto de explotación recoge la previsión de los objetivos que se esperan alcanzar en la explotación del negocio, por eso es la expresión temporal, en términos económico-financieros, de los planes de actuación que la dirección ha fijado para el conjunto de la organización y para cada centro de responsabilidad. Normalmente esta expresión temporal suele ser anual y coincide con el ejercicio económico y debe quedar enmarcado dentro de la misión a largo plazo de la empresa. Para su elaboración es necesario que se determinen, en términos cuantitativos y cualitativos, los recursos que se esperan consumir y obtener en ese periodo tanto de manera global como por los diferentes centros de responsabilidad. Para ello se calculará la suma de los salarios de los trabajadores, materias primas, energía, agua, mantenimiento de maquinaria, e incluso las amortizaciones.

3.5.3 *Análisis de rentabilidad*

Para realizar el análisis de rentabilidad se va a emplear el *VAN*, *TIR* y el *Pay-Back*. Para todos estos cálculos se va a suponer que la explotación de la planta será de 10 años. Se necesitará saber el desembolso inicial, el cual será el presupuesto de inversión, así como el flujo de caja, el cual se define como:

$$\text{Flujo de caja} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = \text{Ventas} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) - \text{Presupuesto de explotación} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) \quad (1)$$

Se considerará un flujo de caja constante para los 10 años.

3.5.3.1 **VAN**

VAN son las siglas de Valor Actual Neto. Este es uno de los indicadores financiero utilizado para valorar y determinar la rentabilidad de un proyecto. Se determina mediante la actualización de los flujos de gastos e ingresos futuros del proyecto, menos la inversión inicial, es decir:

$$\text{VAN} = -D_0 + \sum_{t=1}^n \frac{F}{(1+k)^t} \quad (2)$$

Donde:

- D_0 , es el desembolso inicial (presupuesto de inversión).
- F , el flujo de caja.
- t y n , es el valor de periodos, en este caso años
- k , hace referencia al tipo de descuento o tipo de interés exigido en la inversión.

Hay que remarcar que, si el resultado de esta operación es positivo, es decir, si refleja ganancia se puede decir que el proyecto es viable.

De esta manera la empresa está en posición de evaluar desde el inicio y con proyección a futuro la viabilidad de su proyecto y los resultados de su inversión. El VAN permite conocer la posible rentabilidad a través de una fórmula matemática.

3.5.3.2 TIR

TIR o Tasa Interna de Retorno es uno de los métodos de evaluación de proyectos de inversión más recomendables. Se utiliza frecuentemente para analizar la viabilidad de un proyecto y determinar la tasa de beneficio o rentabilidad que se puede obtener de dicha inversión. Estrechamente ligado al VAN, el TIR también es definido como el valor de la tasa de descuento que iguala el VAN a cero, para un determinado proyecto de inversión. Para considerar que la inversión es rentable este tiene que estar entre el 5% y el 100%. Una cantidad menor al 5%, tendrá un margen de riesgo frente a beneficios demasiado bajo y, por otro lado, valores cercanos al 100% parecen bastante irreales puesto que otorgan un beneficio estratosférico y una fracción muy pequeña de los negocios llegan a este porcentaje. Su resultado viene expresado en valor porcentual.

$$0 = -D_0 + \sum_{t=1}^n \frac{F}{(1 + TIR)^t} \quad (3)$$

Donde, al igual que en el VAN:

- D_0 , es el desembolso inicial (presupuesto de inversión).
- F , el flujo de caja.
- t y n , es el valor de periodos, en este caso años

Hay que tener en cuenta las siguientes situaciones dependiendo de valor que se ha obtenido de TIR:

- Si el valor de $TIR > k$, la inversión debería llevarse a cabo ya la tasa de rendimiento que se obtiene es superior a la tasa mínima de rentabilidad exigida a la inversión.
- Si el valor de $TIR = k$, estaríamos en una situación similar a cuando el VAN era cero.
- Si el valor de $TIR < k$, el proyecto no debe llevarse a cabo puesto que no se alcanza la rentabilidad mínima.

3.5.3.3 Pay-Back

El Pay-Back nos muestra el periodo de tiempo, en este caso años, que tardamos en recuperar una inversión, por lo que se trata de un criterio de liquidez y no de rentabilidad. Se calcula de la siguiente manera:

$$T = \frac{D_0}{F} \quad (4)$$

Donde:

- D_0 , es el desembolso inicial (presupuesto de inversión).
- F , el flujo de caja.
- T , el número de años que se tarda en recuperar el desembolso inicial.

4 Experimental (Cálculo)

En este apartado se van a detallar los cálculos realizados para el diseño del proceso de producción de bioetanol.

Los cálculos se han realizado en torno a una producción elegida del proceso de fermentación de 100 toneladas por año de bioetanol.

4.1 Cálculos de las columnas de purificación

4.1.1 Balance de materia de las columnas de purificación

4.1.1.1 Tamices moleculares

Como se ha comentado anteriormente, se ha escogido como base de cálculo una producción de 100 t/año. Tras conocer esto se va a realizar un balance de materia para conocer las corrientes de las columnas de purificación para más adelante realizar su escalado.

Primeramente, se debe conocer el caudal másico que se obtiene en una hora.

$$10 \frac{t}{año} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 t} \cdot \frac{1 \text{ año}}{365 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} = 1.141 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \quad (5)$$

Tras obtener el valor anterior y sabiendo que en los tamices moleculares se ha tomado como valor de recuperación un 82%, obtenemos el caudal másico de alimentación de los tamices moleculares.

$$\text{recuperación (\%)} = \frac{\text{caudal de entrada}}{\text{caudal de salida}} \quad (6)$$

$$82 \% = \frac{\text{caudal de entrada}}{1.141 \frac{\text{kg}}{\text{h}}} \quad (7)$$

$$\text{Caudal de entrada} = 1.399 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

Sabemos por bibliografía que el 90% del caudal de entrada del tamiz molecular proviene del primer destilador por lo que sabemos que:

$$90\% = \frac{\text{caudal de destilado del primer destilador}}{\text{caudal de entrada del tamiz molecular}} \quad (8)$$

$$90\% = \frac{\text{caudal de destilado del primer destilador}}{1.399 \frac{\text{kg}}{\text{h}}} \quad (9)$$

$$\text{Caudal de destilado del primer destilador } (D1) = 1.3025 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

4.1.1.2 Primera columna de destilación

Sabemos que de la primera torre de destilación se obtiene un caudal de destilado de 13.025 kg/h , con un porcentaje de etanol en peso de 90%. Haciendo un balance de materia la torre de destilación, el caudal de la alimentación se dividirá en un caudal de destilado y un caudal de colas.

$$F_1 = D_1 + W_1 \quad (10)$$

Haciendo el balance de materia respecto al componente de interés (etanol) será:

$$F_1 \cdot x_{F1} = D_1 \cdot x_{D1} + W_1 \cdot x_{W1} \quad (11)$$

Sustituyendo obtenemos que:

$$F_1 \cdot x_{F1} = D_1 \cdot x_{D1} + (F_1 - D_1) \cdot x_{W1} \quad (12)$$

Despejando:

$$F_1 \cdot 0.12 = 1.3025 \frac{kg}{h} \cdot 0.90 + (F_1 - 1.3025 \frac{kg}{h}) \cdot 0.01 \quad (13)$$

$$\text{Caudal de alimentación del destilador 1, } F_1 = 10.538 \frac{kg}{h}$$

$$W_1 = F_1 - D_1 = 10.538 \frac{kg}{h} - 1.3025 \frac{kg}{h} = 9.2359 \frac{kg}{h} \quad (14)$$

Los caudales de alimentación, destilación y fondos del primer destilador se resumen en la Tabla 8

Tabla 8. Caudales del destilador 1

	Caudal kg/h
F₁	10.5385119
D₁	1.30251271
W₁	9.23599922

4.1.1.3 Segunda columna de destilación

Para esta columna se va a seguir el mismo modus operandi que la anterior, a diferencia de que en esta conocemos el caudal de alimentación, ya que en esta columna de destilación se va a procesar el caudal de fondos de la primera columna.

En este caso, como la corriente de alimentación consta de un 1% de etanol, la corriente del destilado llegará a un porcentaje en peso de 90%, mientras que el porcentaje en peso en colas deberá de ser menor. Se decidió que por colas saldrá una corriente con un 0,3% en peso de etanol.

$$F_2 = D_2 + W_2 \quad (15)$$

$$F_2 \cdot x_{F2} = D_2 \cdot x_{D2} + W_2 \cdot x_{W2} \quad (16)$$

Sustituyendo:

$$F_2 \cdot x_{F2} = (F_2 - W_2) \cdot x_{D2} + W_2 \cdot x_{W2} \quad (17)$$

$$9.2359 \frac{kg}{h} \cdot 0.01 = (9.2359 \frac{kg}{h} - W_2) \cdot 0.9 + W_2 \cdot 0.003 \quad (18)$$

Despejando:

$$W_2 = 9.1639 \frac{kg}{h}$$

$$D_2 = F_2 - W_2 = 9.2359 \frac{kg}{h} - 9.1639 \frac{kg}{h} = 0.07206 \frac{kg}{h} \quad (19)$$

Los caudales de alimentación, destilación y fondos del segundo destilador se resumen en la Tabla 9

Tabla 9. Caudales del destilador 2

	Caudal kg/h
F₂	9.23599922
D₂	0.07206664
W₂	9.16393258

4.1.2 Escalado de las columnas de purificación

4.1.2.1 Escalado de los tamices moleculares

Para llevar a cabo el dimensionamiento de un proceso de deshidratación con zeolita A3, se debe tener en cuenta los siguientes aspectos:

- Cantidad requerida del desecante.
- Determinación del diámetro y longitud del lecho.
- Capacidad de la caldera

4.1.2.1.1 Cantidad de zeolita A-3 a emplear en el lecho

Para conocer la cantidad requerida de zeolita primero se debe obtener la densidad de la mezcla etanol-agua.

Para ello se utiliza la (20)

$$\rho_{mezcla} = \rho_{etanol} \cdot x_{etanol} + \rho_{agua} \cdot x_{agua} = 0.79 \cdot 0.9 + 0.99 \cdot 0.1 \quad (20)$$

$$\rho_{mezcla} = 0.810 \frac{kg}{L}$$

Tras obtener el valor de la densidad de la mezcla, se ha de calcular el valor de la cantidad de mezcla que se trata a lo largo de un ciclo de la columna de tamices moleculares. Según bibliografía sabemos que un ciclo del tamiz molecular es de 30 min, por lo que

$$1.399 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1 h}{60 min} \cdot 30 min = 0.6995 kg \text{ de mezcla a tratar} \quad (21)$$

Una vez obtenido el valor de la cantidad de mezcla que se va a tratar en un ciclo y usando como materia prima etanol al 90% eliminaremos el 10% de agua, se obtiene:

$$m_{zeolitamin} = \frac{m_{mezcla} \cdot W_{10\%}}{f} = \frac{0.6995 kg \cdot 0.1}{0.15} = 0.4646 kg \text{ de zeolita seca} \quad (22)$$

Siendo:

- F= Factor de retención de agua en la zeolita.
- W = porcentaje de agua.

4.1.2.1.2 Cálculo del diámetro y altura del empaque interno de la zeolita

Tabla 10. Datos para obtener el diámetro y la altura del lecho interno de zeolita

$\rho_{zwolita} \left(\frac{kg}{L} \right)$	$\emptyset_{asumido} (cm)$	π
1.16	11	3.14

Para calcular el diámetro y la altura del empaque interno primero se ha de calcular el volumen que ocupa la zeolita, para ello se ha utilizado la densidad de la zeolita.

$$\rho_{zeolita} = \frac{m_{zeolita}}{V_{zeolita}} \quad (23)$$

Despejando:

$$V_{zeolita} = \frac{m_{zeolita}}{\rho_{zeolita}} = \frac{0.4646 \text{ kg}}{1.16 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 0.4005 \text{ L} \quad (24)$$

Una vez obtenido el volumen de zeolita que se necesita y suponiendo que los tamices moleculares tienen una forma de cilindro, para facilitar los cálculos, obtenemos la altura de los tamices.

$$V_{zeolita} = \frac{\varnothing^2 \cdot \pi \cdot h_z}{4} \quad (25)$$

Donde:

- \varnothing^2 , es el diámetro del empaque interno, cm
- h_z , es la altura del empaque interno, cm

Despejando:

$$h_z = \frac{V_{zeolita} \cdot 4}{\varnothing^2 \cdot \pi} = \frac{0.4005 \text{ L} \cdot 4}{\left(\frac{1,1}{2}\right)^2 \cdot \pi} = 0.4214 \text{ dm} = 4.214 \text{ cm} \quad (26)$$

Por facilidad de diseño según bibliografía, dejamos 15cm de altura en la parte superior e inferior del tamiz para que ingrese y salga el vapor de alcohol a deshidratar, y 5 centímetros entre el lecho y la malla del tamiz. Por lo que el volumen exterior será:

$$V_{ext} = \frac{\varnothing^2 \cdot \pi \cdot h_z}{4} = \frac{11^2 \cdot \pi \cdot (4.24 + 15 + 15 + 5)}{4} = 3726.63 \text{ cm}^3 = 3.72 \text{ L} \quad (27)$$

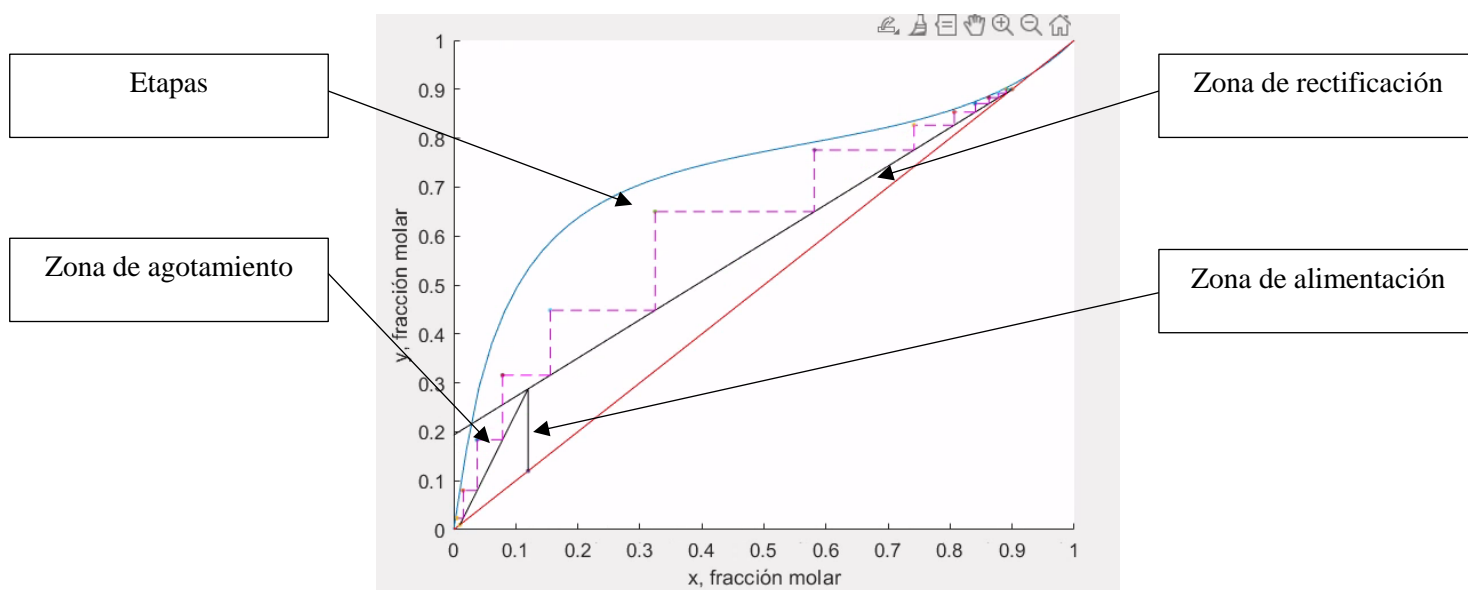
Para contener los 0.4005 litros de zeolita necesitamos un cilindro de 4 L, con un diámetro de 11 cm y una altura de 39.214 cm.

4.1.2.2 Columnas de destilación

Para el escalado de la torre de destilación se parte de los datos de equilibrio de la mezcla etanol-agua, que se han obtenidos del software Chemsep. En este caso se ha usado como temperatura de referencia 298,15 K. En el ANEXO DATOS DE EQUILIBRIO se encuentra los datos, gráficas y funciones de equilibrios obtenidas a partir del software.

Para la resolución numérica usaremos el método de McCabe-Thiele, básicamente con este método simplificado (los flujos molares totales se consideran constantes), y con ayuda del software Matlab seremos capaces de calcular el número de etapas, los flujos molares y composiciones a partir de un balance de materia, por un lado, y por otro las entalpías, temperaturas en los platos y calores de enfriamiento o calefacción, dependiendo en que parte del proceso nos encontremos, a partir de un balance de energía.

Gráficamente se compone de una diagonal $y=x$, donde apoyamos la línea de operación (dividida por la línea de rectificación y agotamiento unidas por la línea de alimentación) y de equilibrio, entre las cuales calcularemos el número de etapas.



Gráfica 1. Cálculo del n° de etapas de una destilación según el método de McCabe-Thiele

A partir de los balances de materia realizados anteriormente, se puede definir matemáticamente cada una de las líneas que podemos ver en el gráfico

- **Zona rectificación**

$$y_{n+1} = \frac{R_D}{R_D + 1} x_n + \frac{x_D}{R_D + 1} \quad (28)$$

Donde la R, se refiere a la relación de reflujo, para este valor se debe determinar un parámetro restrictivo del diseño propio de la destilación, nos referimos a la relación de reflujo mínima (R_{min}), calculada en el ANEXO R_{min} , siguiendo la ecuación (29)

$$\frac{x_w}{1 + R_{min}} = f_y(0) \quad (29)$$

Es decir, tendremos un reflujo mínimo cuando la línea de operación coincide con la curva de equilibrio cortando el punto por donde tenemos el plato de alimentación. En este caso limite tendríamos como consecuencia etapas infinitas.

- **Zona agotamiento**

$$y = \frac{\bar{L}}{\bar{G}}x + \frac{W}{\bar{L}}x_w \quad (30)$$

- **Zona alimentación**

Lo localizamos en la intersección de los dos platos anteriores, por tanto, al igualar ecuaciones, teniendo en cuenta un nuevo término “q”

$$y = \frac{q}{1 - q}x + \frac{z_F}{1 - q} \quad (31)$$

Dicha q, nos servirá para localizar la línea de operación, en este caso trabajamos con líquidos saturados, por lo que $q=1$, de no ser así deberíamos calcularla a partir de las entalpías.

Una vez tenemos los flujos y composiciones, ya seremos capaces de determinar el número de etapas. Si partimos de x_D (zona de enriquecimiento), fracción molar del destilado, trazamos una horizontal que corte a la línea de equilibrio, obteniendo así el primer equilibrio entre fases 1ª etapa, trazamos una línea vertical hacia abajo hasta que corte la línea de operación. Repetimos el proceso, hasta que la línea vertical no corte la zona de enriquecimiento, en ese punto ya habremos llegado a la zona de agotamiento, seguimos trazando líneas hasta que ya no se pueda cortar la zona de agotamiento obteniendo así el n° etapas, ANEXO NÚMERO DE ETAPAS IDEALES. Sin embargo esto no es del todo práctico, pues difícilmente se llega a la idealidad, para solucionar esto, se dará una eficacia real de Murphree para nuestro proceso, en nuestro caso sabemos por bibliografía que para las destilaciones de las mezclas etanol-agua los valores de eficacia

están entre un 75-85%, con el que podremos calcular las etapas reales, por tanto esto nos servirá únicamente de referencia, obviamente tendremos mayor número de etapas reales que ideales, ya que las líneas que anteriormente cortaban la línea de equilibrio, ahora no lo harán, en lugar de llegar a una composición de equilibrio, las llamaremos composiciones operativas. ANEXO NÚMERO DE ETAPAS REALES

Además del número de etapas será interesante calcular cual sería el número de etapas mínimas, condición que se daría en el caso de que la línea de operación coincidiera con la diagonal. En este caso tendríamos un reflujo infinito, y por tanto el tamaño de la columna sería inviable. ANEXO NÚMERO DE ETAPAS MÍNIMAS

Una vez calculado el número de etapas nos faltaría, conocer los intercambios de calor que se dan en el condensador QC y en el calderín QB que calcularemos mediante los balances de energía ANEXO SCRIPT PRINCIPAL, así como los flujos de vapor vivo m_{vapor} y líquido refrigerante m_{agua} , que se debe usar para condensar y refrigerar correctamente

Para el cálculo y diseño de los platos se han utilizado los cálculos realizados en ANEXO CÁLCULO DE DIÁMETRO DE PLATOS. También hay que tener en cuenta que el plato que está sometido a un mayor trabajo es el último plato, es decir el que está a la entrada del Calderín. Esto es así porque le llega el flujo de manera directa.

Por tanto, nos encontramos en el plato con las condiciones más desfavorables, si optimizamos este para que funcione correctamente, nos aseguramos de que los demás también lo hagan. Las composiciones por tanto las extraemos de la figura de etapas, concretamente de la penúltima etapa, pues el Calderín también se produce el equilibrio, y por tanto cuenta como etapa.

Hay que tener en cuenta que el diámetro del plato viene condicionado por las composiciones y flujos que se introduzcan.

Hay que remarcar también que la relación de reflujo se ha escogido mediante un estudio de varios valores, es decir el valor de reflujo mínimo se ha multiplicado por un valor mayor que 1 obteniéndose los siguientes resultados.

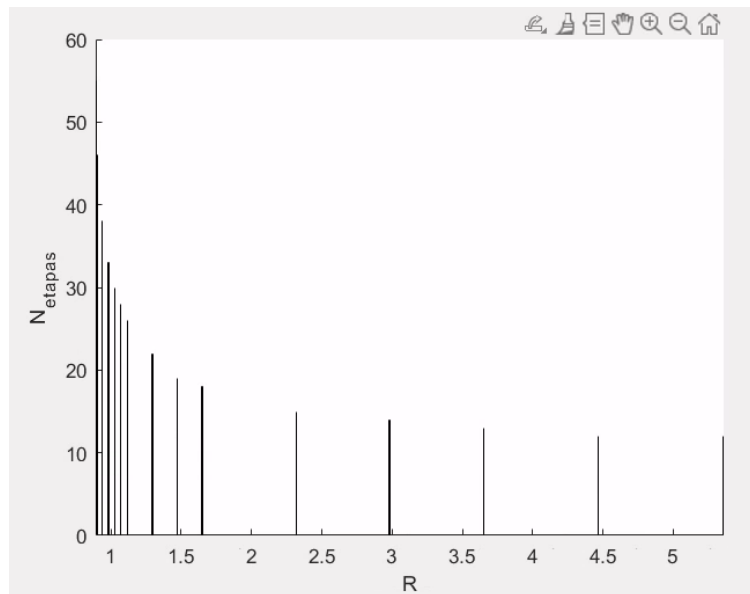


Ilustración 17. Evolución del número de etapas variando el factor de relación de reflujo

Donde:

- N_{etapas} se refiere a l número de etapas del proceso de destilación.
- R, es el factor que multiplica a la relación de reflujo mínima.

Como se puede observar cuanto mayor es el factor menor es el número de etapas del proceso, por lo que se ha decidió escoger un valor para el factor de 3,5, ya que a partir de este valor es cuando se empieza a obtener un número de etapas constante. También hay que destacar que cuanto menor sea el valor del factor, menor será la altura de la columna.

Una vez realizados todos los cálculos, el resultado obtenido del diseño de la columnas se muestran en la Tabla 11 y Tabla 12.

Tabla 11. Condiciones de diseño del primer destilador

Alimentación, F_1	1.369e-04	Kmol/s
Destilado, D_1	1.692e-05	Kmol/s
Residuo, W_1	1.200e-04	Kmol/s
Relación de reflujo mínimo, R_{min}	0.893	-

Relación de reflujo		3.5	-
Número mínimo de etapas		7	-
Número de etapas ideales	Número de etapas	10	-
	Etapa de alimentación	8	-
Número de etapas reales	Número de etapas	14	-
	Etapa de alimentación	11	-
Diámetro del plato		0.152	m
Altura de la columna		7.647	m

Tabla 12. Condiciones de diseños del segundo destilador

Alimentación, F_1		1.600e-04	Kmol/s
Destilado, D_1		1.248e-06	Kmol/s
Residuo, W_1		1.587e-04	Kmol/s
Relación de reflujo mínimo, R_{min}		11.2389	-
Relación de reflujo		2	-
Número mínimo de etapas		7	-
Número de etapas ideales	Número de etapas	8	-
	Etapa de alimentación	7	-
Número de etapas reales	Número de etapas	12	-
	Etapa de alimentación	11	-
Diámetro del plato		0.152	m

Altura de la columna	7.059	m
-----------------------------	-------	---

4.2 Cálculos del tamaño del fermentador/fermentadores

Primero habrá que calcular el número de ciclos necesarios para cumplir el objetivo de producción impuesto, para ello necesitamos conocer el número de horas laborables al año, así como el número de horas que se tardará en realizar cada ciclo, para así con estos dos valores obtener el número de ciclos necesarios.

Lo primero, con el fin de hallar el número de horas laborables, se han buscado los días laborables en España en 2022, descontando días festivos, así como sábados y domingos. Estos han sido:

$$\text{Días laborables en 2022 en España} = 249 \text{ días} \quad (32)$$

A estos 249 días se les descontará un mes (30 días) de vacaciones, mantenimiento...

$$\text{Días laborables reales en 2022 en España} = 249 \text{ días} - 30 \text{ días} = 219 \text{ días} \quad (33)$$

Estos días se pasan a horas para así conocer el número de horas laborables al año. Esto se consigue multiplicando el número de días por el número de horas que hay en un día.

$$\text{Horas laborables en 2022} = 219 \text{ días} \cdot 24 \text{ horas} = 5256 \text{ horas/año} \quad (34)$$

A continuación, se va a calcular el tiempo de cada uno de los ciclos. Para ello se debe sumar cuanto tarda cada uno de los procesos que se dan para la producción.

$$\text{Tiempo de ciclo} = TP + TH + TF + TD = \frac{20}{60} + \frac{10}{60} + 48 + \frac{30}{60} = 49 \text{ Horas} \quad (35)$$

Donde:

- TP es el tiempo del proceso de pretratamiento.
- TH es el tiempo del proceso de la hidrólisis ácida.
- TF es el tiempo del proceso de fermentación.
- TD es el tiempo del proceso de destilación.

No obstante, por motivos de previsión, se le va a añadir un 20% de duración en caso de previsión frente averías, malfuncionamiento, y lo más importante, por añadir los tiempos de carga y descarga del reactor ya que se va a trabajar en discontinuo.

$$\text{Tiempo de ciclo real} = 49 \text{ Horas} + (0.1 \cdot 49) = 53.9 \text{ horas} \quad (36)$$

Redondeando:

$$\text{Tiempo de ciclo real} = 54 \text{ horas/ciclo}$$

Ahora que ya conocemos el tiempo que tardaremos en completar un ciclo, así como el número de horas que se trabajarán al año, estamos en disposición de calcular el número de ciclos que nos harán falta para completar la producción. Este valor se calculará dividiendo el número de horas laborables al año entre el tiempo de cada uno de los ciclos:

$$\text{Número de ciclos} = \frac{\text{Horas laborables al año}}{\text{Tiempo de ciclo}} \quad (37)$$

$$\text{Número de ciclos} = \frac{5256 \frac{\text{horas}}{\text{año}}}{54 \frac{\text{horas}}{\text{ciclo}}} = 97.33 \text{ ciclos/año} \quad (38)$$

Redondeando:

$$\text{Número de ciclos} = 98 \text{ ciclos/año}$$

Ahora ya conocemos el número de ciclos que necesitaremos llevar a cabo para cumplir la producción. Este valor nos servirá para calcular ahora el tamaño del reactor o reactores que necesitaremos.

Se ha explicado antes que, siguiendo el artículo de referencia (Hairui Ji, 2012) del que se obtiene las condiciones de operación del proceso de fermentación, se obtendría supuestamente un rendimiento de 46.42 % de bioetanol en presencia de 280 g de glucosa. Se va a ver cuántos litros se necesitarían para obtener la producción establecida.

$$280 \text{ g glucosa} \cdot 0.4642 = 130.12 \text{ g de bioetanol} \quad (39)$$

La cuestión es, si con 1 Litro somos capaces de producir 130.12 gramos de bioetanol, cuántos litros serán necesarios para producir 92.31 millones de gramos de bioetanol. Se calculará de la siguiente forma:

$$\text{Litros necesarios} = \frac{92.31 \cdot 10^6 \text{ g} \cdot 1\text{L}}{130.12 \text{ g}} = 710133.57 \text{ litros} \quad (40)$$

Ya sabemos los litros necesarios totales, así como los ciclos, con esta información seremos capaces de sacar los litros necesarios por ciclo mediante una simple división.

$$\text{Litros por ciclo} = \frac{\text{litros necesarios}}{\text{ciclos}} = \frac{710133.57}{98} = 7246.26 \frac{\text{litros}}{\text{ciclo}}$$

Redondeando:

$$\text{Litros por ciclo} = 7250 \frac{\text{litros}}{\text{ciclo}} \quad (41)$$

Una vez hallada la cantidad de litros que se requieren por cada ciclo, se puede estimar de que tamaño se necesitará el reactor o reactores.

Tabla 13. Reactor/es y su tamaño

Nº de reactores	Volúmen operativo (L)
1	7250
2	3625

Se va a optar por 2 reactores con un volumen operativo de 3625 Litros. Esto es debido a que, en caso de avería del reactor, si se tuviera un solo reactor, la producción automáticamente se pararía o se ralentizaría, lo que equivaldría a grandes pérdidas económicas y de reputación de la posible empresa.

No obstante, estos 3625 Litros por ciclo se tratarían del volumen operativo del reactor. Hay que tener en cuenta que, si se pretende ser lo más fiel posible al artículo base para así obtener los rendimientos, hay que seguir sus relaciones de volumen del reactor/volumen operativo de éste. Esta relación es importante seguirla ya que, por ejemplo, como se está trabajando con una fermentación, se liberará CO₂ al sistema y si no hay espacio suficiente para la liberación de éste puede haber problemas.

En el artículo trabajan con cinco reactores de 7,5 Litros con un volumen operativo real de 3,75 Litros, por lo que se va a intentar llevar esta ratio al proceso de estudio.

$$\text{Ratio}_P = \text{Ratio}_G \quad (42)$$

$$\frac{7.5 \text{ Litros (reactor)}}{3.75 \text{ Litros (operativos)}} = \frac{x \text{ Litros (reactor)}}{3625 \text{ Litros (operativos)}} \quad (43)$$

$$\text{Litros (reactor)} a \text{ gran escala} = \frac{7.5}{3.75} \cdot 3625 = 7250 \text{ Litros} \quad (44)$$

Con esto obtenemos las condiciones de los reactores que se necesitan:

Tabla 14. Reactor/es y su volumen operativo obtenido

Nº de reactores	Volúmen operativo (L)
1	14500
2	7250

Ahora ya se sabe que se deben comprar 2 reactores de 7250 Litros con un volumen operativo de 3625 Litros.

4.3 Cálculo del escalado, diámetros y altura de los fermentadores.

Como se ha explicado en su sección correspondiente, el escalado pretende mantener una similitud geométrica, es decir las razones entre las longitudes correspondientes deben ser iguales o lo más parecidas en los dos sistemas que se están utilizando.

4.3.1 Cálculo del diámetro y altura del reactor industrial

Primero se deben calcular el diámetro y la altura del reactor que se debe utilizar en la industria. Esto se ha de hacer manteniendo la similitud geométrica con el de la planta piloto.

Los datos de la planta piloto son los siguientes:

- Diámetro del reactor: 80 mm
- Altura del reactor: 300 mm
- Volumen del reactor: 1.5 Litros

Con los datos de la planta piloto se va a tratar de mantener una relación de altura/diámetro (H/D) con los reactores industriales. Se hace hincapié en que se va a tratar de mantener la relación en la medida de lo posible ya que posteriormente habrá que fijarse y buscar los reactores que ofrecen los diferentes fabricantes.

De los datos de la planta piloto se conoce el diámetro y la altura del reactor, por lo que la relación altura/diámetro será:

$$\frac{H}{D} = \frac{300}{80} = 3.75 \quad (45)$$

$$H = 3.75 \cdot D \quad (46)$$

Sabiendo cual es la relación entre altura y diámetro, se puede trasladar a la planta industrial para diseñar el reactor. De la planta industrial se conoce que los volúmenes de los reactores han de ser de 800 *Litros*. Por lo que, utilizando la fórmula del cilindro, ya que esta es la forma más común en reactores.

$$V = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot H \quad (47)$$

No se conoce ni la altura ni el diámetro del reactor, no obstante, con la relación obtenida anteriormente tenemos que:

$$H = 3.75 \cdot D \quad (48)$$

$$7.25 = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot 3.75 \cdot D \quad (49)$$

Despejando el diámetro:

$$D = 1.350 \text{ m de diámetro}$$

Por lo que la altura del reactor será según la relación altura/diámetro:

$$H = 3.75 \cdot 1.350 = 5.063 \text{ m de altura} \quad (50)$$

Redondeando:

$$H = 5.070 \text{ m de altura}$$

Las dimensiones que tendrá el reactor industrial serán una altura de 5.07 metros y un diámetro de 1.35 metros.

4.4 Cálculo de las cantidades necesarias de materias primas para el proceso de fermentación

4.4.1 Cálculo de la cantidad de fuente de carbono necesaria

4.4.1.1 Cantidad de glucosa

En este apartado se van a realizar los cálculos pertinentes de la fuente de carbono necesarias para realizar el proceso, en este caso la cantidad de glucosa necesaria para cada reactor, para un ciclo y el total necesario para la producción total de bioetanol.

Según el artículo que se ha cogido como referencia, sabemos que, para la formación de 130 g de bioetanol en un litro, se necesitan 280 g de glucosa. Por lo que se va a multiplicar este valor por los litros de uno de los reactores, 600 L, con la finalidad de obtener la cantidad de glucosa necesaria para la producción de bioetanol en un reactor.

$$\text{Glucosa para un reactor} = 280 \frac{\text{g}}{\text{L}} \cdot 3625 \text{ L} = 1015000 \text{ g} = 1015 \text{ kg} \quad (51)$$

Tras obtener el valor de lo que necesitamos de glucosa para un reactor, se va a calcular la cantidad que necesitamos para un ciclo entero

$$\text{Glucosa para un ciclo} = 1015000 \text{ g} \cdot 2 = 2030000 \text{ g} = 2030 \text{ kg} \quad (52)$$

Para la producción total se definió que se necesitará llevar a cabo 67 ciclos por lo que la cantidad total de glucosa necesaria para llevar a cabo la producción marcada es de:

$$\text{Glucosa total} = 2030000 \cdot 98 = 198940000 \text{ g} = 198940 \text{ kg} \quad (53)$$

El resumen de la glucosa necesaria se muestra en la Tabla 15

Tabla 15. Resumen de los kg de glucosa necesaria

	Kg de glucosa necesaria
Por reactor	1015
Por ciclo	2030
Total	198940

4.4.1.2 Cálculo de celulosa necesaria

Sabemos que la glucosa necesaria es obtenida a través de la conversión de la celulosa a glucosa mediante una hidrólisis ácida. Esta, según bibliografía, sabemos que tiene un rendimiento del 40,61%, por lo que, conociendo la cantidad de glucosa necesaria y el rendimiento del proceso, se puede calcular la cantidad de celulosa necesaria. Este valor se calculará aplicando inversamente la ecuación (54)

$$\text{Rendimiento (\%)} = \frac{\text{kg glucosa}}{\text{kg celulosa}} \cdot 100 \quad (54)$$

Cantidad de celulosa necesaria para un reactor:

$$40.61 = \frac{1015}{\text{kg celulosa}} \cdot 100 \quad (55)$$

$$\text{Kg celulos para un reactor} = 2488.38\text{kg}$$

Si redondeamos:

$$\text{Kg celulos para un reactor} = 2489 \text{ kg}$$

Cantidad de celulosa necesaria para un ciclo entero

$$40.61 = \frac{2030}{\text{kg celulosa}} \cdot 100 \quad (56)$$

$$\text{Kg celulosa para un ciclo} = 4998.77 \text{ kg}$$

Si redondeamos:

$$Kg \text{ celulosa para un ciclo} = 5000 \text{ kg}$$

Cantidad de celulosa total

$$40.61 = \frac{198940}{\text{kg celulosa}} \cdot 100 \quad (57)$$

$$Kg \text{ celulosa total} = 489879.34 \text{ kg}$$

Si redondeamos:

$$Kg \text{ celulosa total} = 489880 \text{ kg}$$

El resumen de la cantidad de celulosa que se necesita se muestra en la Tabla 16

Tabla 16. Resumen de los kg de celulosa necesarios

	Kg de celulosa necesaria
Por reactor	2500
Por ciclo	5000
Total	489880

4.4.1.3 Cálculo de cáscara de arroz necesaria

Finalmente, una vez calculados la cantidad de celulosa necesaria para llevar a cabo la producción, se van a calcular los kilogramos que hacen falta de cáscara de arroz, teniendo en cuenta que en la cáscara de arroz encontramos un 39.05% de celulosa y con el proceso de pretratamiento conseguimos un rendimiento del 85%. Por lo que para calcular cuanta cantidad de cáscara de arroz se necesita se van a aplicar inversamente el rendimiento del pretratamiento y el porcentaje de celulosa en la cáscara de arroz.

Para un reactor:

$$\text{Rendimiento (\%)} = \frac{\text{kg celulosa después del pretratamiento}}{\text{kg celulosa antes del pretratamiento}} \cdot 100 \quad (58)$$

$$85 (\%) = \frac{2500}{\text{kg celulosa antes del pretratamiento}} \cdot 100 \quad (59)$$

$$\text{kg celulosa antes del pretratamiento} = 2941 \text{ kg}$$

Tras obtener la cantidad de celulosa que se tiene antes del pretratamiento, se va a calcular la cáscara de arroz necesaria

$$\% \text{ de celulosa en la cáscara de arroz} = \frac{\text{kg celulosa}}{\text{kg cáscara de arroz}} \cdot 100 \quad (60)$$

$$39.05 \% = \frac{2941}{\text{kg cáscara de arroz}} \cdot 100 \quad (61)$$

$$\text{kg de cáscara de arroz para un reactor} = 7529.96 \text{ kg}$$

Redondeando al alza:

$$\text{kg de cáscara de arroz para un reactor} = 7530 \text{ kg}$$

Cantidad de cáscara de arroz para un ciclo

$$85 (\%) = \frac{5000}{\text{kg celulosa antes del pretratamiento}} \cdot 100 \quad (62)$$

$$\text{kg celulosa antes del pretratamiento} = 5882 \text{ kg}$$

$$39.05 \% = \frac{5882}{\text{kg cáscara de arroz para un ciclo}} \cdot 100 \quad (63)$$

kg de cáscara de arroz para un ciclo = 15059.93 kg

Redondeando:

kg de cáscara de arroz para un ciclo = 15060 kg

Cantidad de cáscara de arroz total

$$85 (\%) = \frac{489880}{\text{kg celulosa antes del pretratamiento}} \cdot 100 \quad (64)$$

kg celulosa antes del pretratamiento = 576330 kg

$$39.05 \% = \frac{576330}{\text{kg cáscara de arroz total}} \cdot 100 \quad (65)$$

kg de cáscara de arroz para un ciclo = 1475873.58 kg

Redondeando:

kg de cáscara de arroz para un ciclo = 1475874 kg

El resumen de la cantidad de cáscara de arroz que se necesita se muestra en la Tabla 17

Tabla 17. Resumen de los kg de cáscara de arroz necesarios

	Kg de cascara de arroz necesaria
Por reactor	7530
Por ciclo	15060
Total	1475874

4.4.2 Cálculo de la cantidad de fuente de nitrógeno necesaria

En este apartado se va a realizar los cálculos pertinentes para así conocer la cantidad de fuente de nitrógeno necesaria para cada reactor, para un ciclo y el total necesario para la producción de bioetanol. La fuente de nitrógeno va a estar formada por polipeptona.

Sabemos por bibliografía, que la cantidad de nitrógeno utilizado para un litro de medio de fermentación utilizado contiene 10 g de polipeptona. Sabiendo esto y con los litros que se necesitan por reactor, por ciclo y en total, se puede calcular cuanta cantidad de fuente de carbono necesitamos.

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno} = \text{g polipeptona} \cdot \text{Litros} \quad (66)$$

Cantidad de fuente de nitrógeno para un reactor:

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por reactor} = 10 \cdot 3625 = 36250 \text{ g} \quad (67)$$

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por reactor} = 36.25 \text{ kg}$$

Cantidad de fuente de nitrógeno para un ciclo

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por ciclo} = 36250 \cdot 2 = 72500 \text{ g} \quad (68)$$

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por ciclo} = 72.5 \text{ kg}$$

Cantidad total de fuente de nitrógeno:

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por ciclo} = 72500 \cdot 98 = 7105000 \text{ g} \quad (69)$$

$$\text{Cantidad de fuente de nitrógeno por ciclo} = 7105 \text{ kg}$$

El resumen de la cantidad de fuente de nitrógeno se describe en la Tabla 18

Tabla 18. Resumen de los kg de fuente de nitrógeno necesarios

	kg de nitrógeno necesarios
Por reactor	36.25
Por ciclo	72.5
Total	7105

4.4.3 Cálculos de la cantidad de fuente de fosfato necesaria

Según bibliografía sabemos que la fuente de fosfato será K_2HPO_4 , y que estelo encontramos en una cantidad de 1g/L, es decir por cada litro encontraremos 1g de K_2HPO_4 , por lo que, para calcular la cantidad necesaria para un reactor, un ciclo y en total de fuente de fósforo habrá que multiplicar la masa por los litros de cada reactor

Cantidad de fuente de fosfato para un reactor

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ para un reactor} = 1 \text{ g} \cdot 3625 \text{ L} = 3625 \text{ g} \quad (70)$$

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ para un reactor} = 3.625 \text{ kg}$$

Cantidad de fuente de fosfato para un ciclo

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ para un ciclo} = 3625 \text{ g} \cdot 2 = 7250 \text{ g} \quad (71)$$

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ para un ciclo} = 7.25 \text{ kg}$$

Cantidad de fuente de fosfato total

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ total} = 7250 \text{ g} \cdot 98 = 710500 \text{ g} \quad (72)$$

$$\text{Cantidad de } K_2HPO_4 \text{ para un ciclo} = 7710.5 \text{ kg}$$

El resumen de la cantidad de fuente de fosfato se describe en la Tabla 19

Tabla 19. Resumen de los kg de fuente de fosfato necesarios

	kg de fosforo necesarios
Por reactor	3.625
Por ciclo	7.25
Total	710.5

4.4.4 Cálculo de la cantidad de fuente de minerales

La fuente de minerales a utilizar será $MgSO_4$ y $ZnSO_4$. Sabemos por el artículo de referencia que se necesita 2 g/L de $MgSO_4$ y 0.5g/L de $ZnSO_4$, con estos valores se pueden calcular las cantidades de minerales que se necesitan para un reactor, un ciclo y en total.

4.4.4.1 Cantidad de $MgSO_4$ necesaria.

Primero, se va a calcular la cantidad de $MgSO_4$ necesario por reactor, por ciclo completo y finalmente para cumplir la producción total.

Cantidad de $MgSO_4$ necesaria para un reactor

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ para un reactor} = 2 \text{ g} \cdot 3625\text{L} = 7250 \text{ g} \quad (73)$$

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ para un reactor} = 7.25 \text{ kg}$$

Cantidad de $MgSO_4$ necesaria para un ciclo

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ para un ciclo} = 7250 \text{ g} \cdot 2 = 14200 \text{ g} \quad (74)$$

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ para un ciclo} = 14.2 \text{ kg}$$

Cantidad de $MgSO_4$ total

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ total} = 14200 \text{ g} \cdot 98 = 1421000 \text{ g} \quad (75)$$

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \text{ total} = 1421 \text{ kg}$$

El resumen de la cantidad de $MgSO_4$ se describe en la Tabla 20.

Tabla 20. Resumen de los kg necesarios de $MgSO_4$

	Kg de $MgSO_4$ necesarios
Por reactor	7.25
Por ciclo	14.5
Total	1421

Hay que tener en cuenta que el sulfato de magnesio comercial se adquiere de forma hidratada, es decir $MgSO_4 \cdot 7H_2O$, por lo que se va a calcular la cantidad necesaria de sulfato de magnesio comercial.

Para ello primero debemos obtener la proporción de sulfato de magnesio que se encuentra en la mezcla, para ello se deben conocer los valores del peso molecular tanto de la mezcla como del sulfato de magnesio.

$$PM_{MgSO_4} = 120.36 \frac{g}{mol}$$

$$PM_{MgSO_4 \cdot 7H_2O} = 246.48 \frac{g}{mol}$$

Por lo que la proporción de sulfato de magnesio que hay en la mezcla es:

$$\% \text{ de } MgSO_4 = \frac{120.36}{246.48} = 48.83\% \quad (76)$$

Con el valor de la proporción se obtienen las cantidades de sulfato de magnesio comercial que se necesitan para un reactor, para un ciclo y para el total del proceso.

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \cdot 7H_2O \text{ para un reactor} = \frac{7250}{0.4883} = 14850g = 14.85 \text{ kg} \quad (77)$$

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \cdot 7H_2O \text{ para el ciclo} = \frac{14500}{0.4883} = 29690g = 29.69 \text{ kg} \quad (78)$$

$$\text{Cantidad de } MgSO_4 \cdot 7H_2O \text{ total} = \frac{1421000}{0.4883} = 2909760g = 2909.76 \text{ kg} \quad (79)$$

El resumen de la cantidad de $MgSO_4 \cdot 7H_2O$ se describe en la Tabla 21

Tabla 21. Cantidad de sulfato de magnesio comercial

	Kg de MgSO4 necesarios
Por reactor	14.85
Por ciclo	29.69
Total	2909.76

4.4.4.2 Cantidad de $ZnSO_4$ necesario

A continuación, se va a calcular la cantidad de $ZnSO_4$ necesario por reactor, por ciclo completo y finalmente para cumplir la producción total.

Cantidad de $ZnSO_4$ necesaria para un reactor

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ para un reactor} = 0.5 \text{ g} \cdot 3625 \text{ L} = 1812.5 \text{ g} \quad (80)$$

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ para un reactor} = 1.8125 \text{ kg}$$

Cantidad de $ZnSO_4$ necesaria para un ciclo

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ para un ciclo} = 1812.5 \cdot 2 = 3625 \text{ g} \quad (81)$$

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ para un ciclo} = 36.25 \text{ kg}$$

Cantidad de $ZnSO_4$ total

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ total} = 3625 \text{ g} \cdot 98 = 355250 \text{ g} \quad (82)$$

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \text{ total} = 355.25 \text{ kg}$$

El resumen de la cantidad de $ZnSO_4$ se describe en la Tabla 22

Tabla 22. Resumen de los Kg de $ZnSO_4$ necesarios

	Kg de $ZnSO_4$ necesarios
Por reactor	1.8125
Por ciclo	3.625
Total	355.25

Hay que tener en cuenta que el sulfato de magnesio comercial se adquiere de forma hidratada, es decir $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$, por lo que se va a calcular la cantidad necesaria de sulfato de magnesio comercial.

Para ello primero debemos obtener la proporción de sulfato de magnesio que se encuentra en la mezcla, para ello se deben conocer los valores del peso molecular tanto de la mezcla como del sulfato de magnesio.

$$PM_{ZnSO_4} = 161.45 \frac{g}{mol}$$

$$PM_{ZnSO_4 \cdot 7H_2O} = 287.55 \frac{g}{mol}$$

Por lo que la proporción de sulfato de magnesio que hay en la mezcla es:

$$\% \text{ de } ZnSO_4 = \frac{161.45}{287.55} = 56.15\%$$

Con el valor de la proporción se obtienen las cantidades de sulfato de magnesio comercial que se necesitan para un reactor, para un ciclo y para el total del proceso.

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \cdot 7H_2O \text{ para un reactor} = \frac{1812.5}{0.5615} = 3230 \text{ g} = 3.23 \text{ kg} \quad (83)$$

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \cdot 7H_2O \text{ para el ciclo} = \frac{3625}{0.5615} = 6460 \text{ g} = 6.46 \text{ kg} \quad (84)$$

$$\text{Cantidad de } ZnSO_4 \cdot 7H_2O \text{ para el ciclo} = \frac{355250}{0.5615} = 632700 \text{ g} = 632.7 \text{ kg} \quad (85)$$

El resumen de la cantidad de $ZnSO_4$ comercial se describe en la Tabla 23

Tabla 23. Cantidad de $ZnSO_4$ comercial necesaria

	Kg de $ZnSO_4 \cdot 7H_2O$ necesarios
Por reactor	3.23
Por ciclo	6.46
Total	632.70

4.4.5 Cantidad de *Saccharomyces cerevisiae* necesaria

Sabemos por bibliografía que la cantidad que se añade por litro de levadura es de entre 12-15 g. En este trabajo se ha decidido trabajar con 15 g de *Saccharomyces cerevisiae*.

Cantidad de levadura necesaria para un reactor

$$S. \text{ cerevisiae} = 15 \frac{\text{g}}{\text{L}} \cdot 3625 \text{ L} = 54375 \text{ g} = 54.375 \text{ kg} \quad (86)$$

Cantidad de levadura necesaria para un ciclo

$$S. cerevisiae = 54375 \cdot 2 = 108750 \text{ g} = 108.75 \text{ Kg} \quad (87)$$

Cantidad de levadura necesaria total

$$S. cerevisiae = 108750 \cdot 98 = 10657500 \text{ g} = 10657.5 \text{ Kg} \quad (88)$$

El resumen de la cantidad de *S. cerevisiae* comercial se describe en la Tabla 24

Tabla 24. Cantidad de *S. cerevisiae* necesarias

	Kg de <i>S. cerevisiae</i> necesarios
por reactor	54.375
por ciclo	108.75
total	10657.5

4.5 Cálculos del tamaño del reactor del proceso de hidrólisis

La hidrólisis ácida es el proceso mediante el cual la celulosa se transforma en glucosa, la cual es la fuente de carbono de este proceso. Para los cálculos del proceso de hidrólisis se van a con los valores usa necesarios para realizar un ciclo completo.

Tabla 25- Cantidad de celulosa necesaria para completar un ciclo

	Kg de celulosa necesaria
Por ciclo	5000

4.5.1 Volumen de ácido necesario

Para la hidrólisis ácida se va a utilizar ácido sulfúrico 1% (p/p), es decir $1\% \frac{\text{g soluto}}{\text{g disolución}}$. A continuación, se van a calcular los kilogramos necesarios de ácido sabiendo que el ratio sólido-líquido según bibliografía

(Juliaín A. Quintero, 2011) es de 1:9, siendo el sólido la celulosa y el líquido la solución de ácido. Se utilizan 552 kg de celulosa, por lo que según la ratio establecida habrá 9 veces más líquido

$$\text{Kg de solución de ácido} = \text{Kg de celulosa} \cdot 9 = 5000 \cdot 9 = 42500 \text{ kg} \quad (89)$$

Sabiendo que el ácido sulfúrico se encuentra en una concentración de 1% p/p, podemos calcular la cantidad necesaria de ácido para realizar un ciclo completo.

$$1\% \left(\frac{p}{p} \right) = \frac{\text{kg soluto}}{\text{kg disolución}} = \frac{g \text{ soluto}}{42500} \quad (90)$$

Por lo que despejando obtenemos:

$$\text{Kg de ácido} = 425 \text{ kg}$$

No obstante, el ácido sulfúrico no llega a concentraciones del 100%, sino a un 98%, por lo que se deberá añadir un poco más de ácido en el medio:

$$\text{Kg}_{H_2SO_4} (98\%) = \frac{425}{0.98} = 433.67 \text{ kg} \quad (91)$$

Una vez calculados los kilogramos de ácido necesarios para completar la producción de 1 ciclo, mediante el uso de la densidad del ácido, se calculará el volumen en Litros que ocupará el ácido en el tanque:

$$d_{H_2SO_4} = 1.8361 \frac{\text{kg}}{\text{L}}$$

Por lo que el volumen de ácido será:

$$V = \frac{\text{kg ácido}}{\rho \text{ ácido sulfúrico}} = \frac{433.67}{1.8361} = 236.19 \text{ L} \quad (92)$$

4.5.2 Volumen de agua necesaria

Una vez se conoce la masa total que ocupa la disolución y se ha calculado la masa que ocupa el ácido, se puede calcular con una resta la masa que ocupará el agua.

$$\text{kg de agua} = \text{kg disolución} - \text{kg ácido} = 42500 - 433.67 = 42066.32 \quad (93)$$

Mediante la fórmula de la densidad, despejando, se calculará el volumen de agua:

$$V = \frac{\text{kg agua}}{\rho \text{ agua}} = \frac{42066.32}{0.998} = 42150.62 \text{ L} \quad (94)$$

4.5.3 Volumen total de los tanques

Conocidos los volúmenes que ocuparán por separado los dos compuestos, se pueden sumar para calcular el volumen total necesario y ver cuan grandes serán los tanques necesarios:

$$V. \text{total} = V. \text{agua} + V. \text{acido} = 42150.62 + 236.19 = 42386.82 \text{ L} \quad (95)$$

Se redondea por seguridad:

$$V. \text{total} = 42400 \text{ L}$$

$$V. \text{tanque} = \frac{42400}{2} = 21200 \text{ L} = 21.2 \text{ m}^3 \quad (96)$$

Se utilizarán 2 tanques de 2500 Litros

4.5.4 Cálculo de la cantidad de NaOH a añadir para neutralizar el ácido del proceso de hidrólisis

Al utilizar ácido sulfúrico 1% p/p, el valor del *pH* del medio será muy bajo, situación que evitará el correcto funcionamiento del proceso. Es por esto por lo que se debe neutralizar el medio hasta conseguir un valor del *pH* entre 4.5-5.5. Para ello se va a utilizar *NaOH* en estado sólido, para no variar el volumen en gran medida. Una reacción de neutralización se basa en el siguiente principio:



Los iones H^+ del ácido y los iones OH^- de la base reaccionan para dar agua.

En el caso del trabajo, se utiliza H_2SO_4 y $NaOH$ por lo que se expresará como:



La sal se encontrará disuelta en el agua y al ser una sal que no es peligrosa ni afectará al medio no se le hará ningún tipo de tratamiento, se dejará disuelta en el medio. Por otro lado, al tratarse de un ácido y una base fuertes, se disocian por completo. Para lograr un pH de 5,5, primero hay que calcular la cantidad de ácido que se ha quedado sin neutralizar:

$$\text{pH} = -\log_{10}([H^+]) \quad (99)$$

Despejando:

$$[H^+] = 10^{-\text{pH}} = 10^{-5.5} = 3.16 \cdot 10^{-6} \text{ M} \quad (100)$$

Una vez obtenida la concentración del ácido remanente, hay que calcular el número de moles de ácido inicial.

$$433.67 \text{ kg} \cdot \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1 \text{ mol de } H_2SO_4}{98.08 \text{ g de } H_2SO_4} = 4421.62 \text{ moles de } H_2SO_4 \quad (101)$$

Sabiendo que para calcular la cantidad de ácido que queda en el medio es mediante la diferencia entre el número de moles del ácido fuerte y de la base fuerte, partido el volumen de la disolución, podemos calcular el número de moles del $NaOH$ y con esto y el peso molecular de la base calcular cuantos kilogramos de base hacen falta.

$$[H^+] = \frac{\text{moles ácido} - \text{moles base}}{L \text{ disolución}} \quad (102)$$

$$3.16 \cdot 10^{-6} M = \frac{4421.629 \text{ moles de } H_2SO_4 - \text{moles base}}{42400 L} \quad (103)$$

Despejando obtenemos el número de moles de NaOH necesarios:

$$\text{Moles de NaOH} = 4421.456$$

Con el peso molecular del hidróxido de sodio, se obtiene los kilogramos de base necesarios

$$4421.456 \text{ moles NaOH} \cdot \frac{1 \text{ kmol NaOH}}{1000 \text{ moles NaOH}} \cdot \frac{40 \text{ kg}}{1 \text{ kmol NaOH}} \quad (104)$$

$$= 176.86 \text{ kg de NaOH}$$

En la Tabla 26 se resumen la cantidad de NaOH

Tabla 26. Resumen de las cantidades de NaOH necesarias

	Kg de NaOH
Por ciclo	110.536403
Total	10832.5675

4.6 Cálculos del tamaño del reactor del proceso de pretratamiento

El proceso con agua líquida caliente usa agua a elevadas temperaturas y presiones para mantener su fase líquida y así promover la separación y remoción de la matriz de lignina. A continuación, se van a calcular el volumen del tanque donde se va a llevar a cabo el pretratamiento sabiendo que la ratio sólido-líquido según bibliografía (Guoce Yu, 2010) es de 1:7, siendo el sólido la cáscara de arroz y el líquido agua. Se utilizan 1662 kg de celulosa, por lo que según la ratio establecida habrá 7 veces más líquido.

$$\text{Cantidad total} = \text{kg de cascara} \cdot 7 = 15060 \cdot 7 = 105420 \text{ kg} \quad (105)$$

Al igual que en el apartado del escalado del volumen del proceso de hidrólisis ácida, a partir de la diferencia entre la cantidad total de kilogramos que se encuentran en el proceso de pretratamiento y la cantidad de kg de cáscara de arroz, obtenemos los kg de agua.

$$\text{kg agua} = \text{kg totales} - \text{kg de cáscara de arroz} = 105420 - 15060 = 90360 \text{ kg} \quad (106)$$

Una vez obtenido la cantidad de agua necesaria, con el valor de la densidad del agua se calcula el volumen necesario para el tanque de pretratamiento.

$$d_{\text{agua}} = 0.998 \frac{\text{kg}}{\text{L}}$$

$$\text{Litros agua} = \frac{90360 \text{ kg}}{0.998 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 90541.08 \text{ L} \quad (107)$$

A partir de la cantidad de cáscara de arroz y su densidad conseguimos el volumen de cáscara de arroz, para después finalmente calcular el volumen total del proceso.

$$d_{\text{cáscaradearroz}} = 1.58 \frac{\text{kg}}{\text{L}}$$

$$\frac{15060 \text{ kg}}{1.58 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 9531.65 \text{ L} \quad (108)$$

$$\frac{(9531.65 \text{ L} + 90541.08 \text{ L})}{2} = 50036.36 \text{ L} = 50.04 \text{ m}^3 \quad (109)$$

Se tendrán dos tanques de pretratamiento de 51 m^3 . Por seguridad y por mantenimiento se van a introducir dos tanques de pretratamiento, así si uno de los dos se estropea, al tener el otro en funcionamiento la producción no se parará.

5 Estudio económico

Una vez llevado a cabo el dimensionado se puede estimar de manera aproximada el coste que supondrá la producción estima de bioetanol, en este caso, por año de trabajo. Para ello se considerarán todos los elementos, reactivos y personal necesario para su correcto funcionamiento.

5.1 Presupuesto de inversión

El presupuesto de inversión se considera como la suma del dinero necesario para poder iniciar las operaciones deseadas, en este caso, el uso de todo el equipo necesario para llevar a cabo la producción correctamente. A continuación, se detallan el presupuesto correspondiente a la maquinaria necesaria, considerando el precio en base a catálogos online y estimando el precio para cada equipo dentro de un rango que ofrecía el catálogo:

Tabla 27. Presupuestos de inversión

Equipos y maquinaria			
Equipos	Unidad	Precio (€/Unidad)	Precio (€)
Columna de adsorción con llave de paso y conexiones rápidas.	2.00	234.25	468.50
Zeolita	0.93	2.42	2.25
Columna de destilación JH	2.00	5571.13	11142.26
Fermentador	2.00	9878	19756.00
Reactor de hidrólisis ácida	2.00	11618.83	23237.66
Reactor de pretratamiento	2.00	22645.00	45290.00
Instalación de tuberías de unión de tanques (Aproximado)	1.00	5000.00	5000.00
Instrumentos varios (Pipetas, matraces, básculas)	1.00	1000.00	1000.00
Bomba hidráulica	10.00	387.30	3873.00
Almacenamiento materia prima	1.00	9254.92	9254.92
Nave industrial	1.00	165000.00	165000.00
Total			284024.59

De esta forma, el presupuesto de inversión es:

$$\text{Presupuesto de inversión} = 284024.59 \text{ €}$$

Este presupuesto es el que habrá que desembolsar para iniciar las actividades. Se van a detallar más o menos algunos de los precios más característicos de este presupuesto:

En primer lugar, para las columnas de adsorción de tamices moleculares se ha elegido unas columnas de PVC con un diámetro y altura similar a la estimada.

Para las columnas de destilación se ha tenido en cuenta que las dimensiones de los diámetros de los platos, el número de estos y la altura de la columna estén sujetas a petición, por lo que se pedirá con las especificaciones calculadas anteriormente.

Para el fermentador, se ha buscado un fermentador el cual tuviera sistema de aireado y agitación a través del movimiento del fluido, pues estos dos parámetros son claves para llevar a cabo el proceso en las condiciones óptimas. Además, era necesario que el fermentador tuviera un monitoreo de la temperatura y un control de *pH*. Las dimensiones de este fermentador están sujetas a petición, por lo que se pedirá con las especificaciones calculadas anteriormente.

Los tanques para la hidrólisis ácida deberán ser tanques verticales calefactados. Calefactado para mantener la temperatura en 170 grados, la óptima para el proceso de hidrólisis.

Los tanques para el pretratamiento ácida deberán ser tanques verticales calefactados. Verticales para al precipitar las cascaras de arroz después del proceso que sea fácil eliminarlas del medio y calefactado para mantener la temperatura en 150 grados, la óptima para el proceso de pretratamiento.

5.2 Presupuesto de explotación

Los gastos de explotación hacen referencia a la previsión que se realiza sobre el coste de mantener el reactor en funcionamiento. En este apartado se tienen en cuenta factores como las materias primas, los empleados o incluso las amortizaciones. Se va a mantener el constante para el total de los 10 años a estudiar. En este caso se presentarán valores aproximados, ya que de dichos costes solo serán conocidos en absoluta exactitud cuando el proceso entre en funcionamiento.

5.2.1 Materias primas

Los costes de las materias primas se detallan en la Tabla 28

Tabla 28. Costes de materia prima

Materias primas			
Materia prima	kg/año	€/kg	€/año
Cáscara de arroz	1475873.59	0.07	103311.15
Polipeptona	7105.00	12.13	86183.65

K_2HPO_4	710.50	1.73	1229.17
$MgSO_4 \cdot 7H_2O$	2909.76	2.76	8021.63
$ZnSO_4 \cdot 7H_2O$	632.70	2.80	1771.56
H_2SO_4	42500.00	0.18	7623.65
NaOH	17332.73	0.09	1554.57
<i>Saccharomyces cerevisiae</i>	8526.00	3.22	27453.72
Total	237149,10		

Como se puede observar las materias primas necesarias para un año de producción tienen un coste:

$$\text{Costes materias primas} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 237149,10 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

El microorganismo cada vez que se vaya a realizar un ciclo se compra una cepa de este. Las específicas condiciones de conservación hacen que conservarlo pueda suponer mayor coste que el propio coste de comprarlo cada vez sin embargo, sería interesante el estudio de este factor, ya que sabemos por bibliografía que este es capaz de trabajar durante 20 días manteniendo el mismo rendimiento de bioetanol.

Todos los precios han sido sacados de catálogos en internet, algunos tendrán más precisión que otros debido a que algunos productos ofrecen intervalos de precios.

A continuación, se detallan los costes derivados de los sueldos de la plantilla de los trabajadores. Se contará con un total de 7 trabajadores, entre operarios y jefes de planta. Los sueldos mostrados en la Tabla 29 se han obtenido de diversos estudios sobre sueldos medios en España en 2022:

Tabla 29. Salarios de los trabajadores

Plantilla			
Personal	Unidades	salario (€/año)	Total (€/año)
Jefe de planta	1.00	38275.00	38275.00
Operarios	6.00	18700	112200.00
Total		150475.00	

El total de los sueldos al año será:

$$\text{Total costes de sueldos} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 150475.00 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

Se han supuesto 6 ingenieros, 2 por cada turno de 8 horas y 1 jefe de planta que supervise. Se ha decidido poner 2 obreros por turno por seguridad.

Seguidamente se desglosan los gastos energía y agua. Al ser grande, estos gastos supondrán un alto coste, sobre todo los gastos energéticos. Los datos de costes de energía y agua se han sacado de respectivas tarifas activas:

Tabla 30. Costes de energía

Energía									
Equipos	Unidades	kW/unidad	Kw	h/ciclo	ciclos/año	h/año	kWh/año	€/kWh	costes (€/año)
Columna de destilación JH	2.00	12.00	24.00	0.50	98.00	49.00	1176.00	0.19	225.61
Fermentador	2.00	22.00	44.00	48.00	98.00	4704.00	206976.00	0.19	39707.72
Reactor de hidrólisis ácida	2.00	38.00	76.00	0.17	98.00	16.33	1241.33	0.19	238.15
Reactor de pretratamiento	2.00	45.00	90.00	0.33	98.00	32.67	2940.00	0.19	564.03
Bomba hidráulica	10.00	1.30	13.00	0.41	98.00	40.18	522.34	0.19	100.21
Total costes de energía (€/año)	40835.72								

El coste total de la electricidad con una tarifa de 0.19 €/kWh de media es de:

$$\text{Coste total de energía} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 40835.72 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

La tarifa contratada corresponde a la tarifa Plan 3.0 de la empresa Iberdrola la cual está hecha para empresas que utilicen entre 15 y 450 kW.

Los gastos de agua se representan en la Tabla 31

Tabla 31. Costes de agua

Agua							
Equipos	Unidades	L/unidad	L/ciclo	ciclos/año	L/año	Coste (€/L)	Coste(€/año)
Reactor de hidrólisis ácida	2.00	21075.31	42150.63	98.00	4130761.52	0.0019	7889.75
Reactor de pretratamiento	2.00	45270.54	90541.08	98.00	8873026.05	0.0019	16947.48
Total coste de agua (€/año)	24837.23						

El coste total del agua utilizada con una tarifa de 1.91 €/m³ obtenida del coste medio del suministro de agua en España es de:

$$\text{Coste total de agua} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 24837.23 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

Hay que tener en cuenta que uno de los parámetros a considerar en la industria es el mantenimiento del equipo y las infraestructuras, por seguridad y por evitar males mayores que sean irreparables y que a su vez estos produzcan un gran coste de dinero. A continuación, se especifican los costes de mantenimiento, suponiendo este como un 10% del total del coste de la maquinaria.

Tabla 32. Costes de mantenimiento

	% Presupuesto de inversión	Total (€/año)
Coste de mantenimiento de la maquinaria	10%	28402.46

El coste total del mantenimiento de la maquinaria y el equipo es de:

$$\text{Coste del mantenimiento de la maquinaria} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 28402.46 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

Por último, se calculan las amortizaciones, es decir, cuanto se reserva cada año para recuperar la inversión inicial. La amortización por año se considera igual a la depreciación sufrida ese mismo año. Para mantener flujos de caja iguales todos los años se va a suponer el método de la depreciación lineal:

$$D = \frac{V_a}{n} \quad (110)$$

Donde:

- V_a , es la inversión inicial.
- n , es el número de año de vida útil.
- D , es la depreciación.

Las amortizaciones se muestran en la tabla Tabla 33

Tabla 33. Coste total de las amortizaciones

Amortizaciones			
Equipos	Inv. Inicial (€)	Vida útil (año)	Depreciación(€/año)
Columna de adsorción con llave de paso y conexiones rápidas.	468.50	10.00	46.85
Zeolita	2.25	10.00	0.22
Columna de destilación JH	11142.26	10.00	1114.23
Fermentador	19756.00	10.00	1975.60
Reactor de hidrólisis ácida	23237.66	10.00	2323.77
Reactor de pretratamiento	45290.00	10.00	4529.00
Instalación de tuberías de unión de tanques (Aproximado)	5000.00	10.00	500.00
Instrumentos varios (Pipetas, matraces, básculas)	1000.00	10.00	100.00
Bomba hidráulica	3873.00	10.00	387.30
Almacenamiento materia prima	9254.92	10.00	925.49
Nave industrial	165000.00	10.00	16500.00
Total de coste de amortizaciones (€/año)	28402.46		

El coste total de amortización es de:

$$\text{Coste de amortización} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 28402.46 \frac{\text{€}}{\text{año}}$$

Finalmente, conociendo todos estos gastos, el presupuesto de explotación de la planta será la suma de todos los gastos:

$$\begin{aligned} \text{Presupuesto de explotación} &= 237149,10 + 150475,00 + 40835,72 + 24837,23 + \quad (111) \\ &28402,46 + 28402,46 = 516965,41 \frac{\text{€}}{\text{año}} \end{aligned}$$

En la Tabla 34 se resumen los presupuestos de inversión y de explotación

Tabla 34. Presupuesto de inversión y de explotación

	Total (€/año)
Presupuesto de explotación	516965.41
Presupuesto de inversión	284024.59

A continuación, se va a calcular el dinero que se va a ganar con las ventas del producto. En un principio se ha diseñado el proceso para generar 10 toneladas de bioetanol al año. Se sabe que el precio de bioetanol de un 96% de alta calidad puede llegar a alcanzar un precio de 3 €/L, pero debido que en este caso se ha añadido un proceso de purificación se obtiene bioetanol ultrapuro de 99,5% de pureza por lo que su precio aumenta hasta unos valores mayores. Para saber a qué precio se ha de vender el etanol ultrapuro producido, primero debemos conocer cuánto nos cuesta producir un litro de bioetanol, para ello se va a calcular a partir de los presupuestos de inversión y de explotación, pero primero tenemos que saber cuantos litros producimos en un año.

$$10 \frac{\text{t}}{\text{año}} \cdot \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ t}} = 10000 \frac{\text{kg}}{\text{año}} \quad (112)$$

$$d = \frac{m}{v} \rightarrow v = \frac{m}{d} = \frac{10000 \frac{\text{kg}}{\text{año}}}{0,79 \frac{\text{kg}}{\text{L}}} = 12674,27 \frac{\text{L}}{\text{año}} \quad (113)$$

Cuanto nos cuesta producir un litro de bioetanol

$$\frac{P. \text{ explotación}}{L \text{ producidos en un año}} = \frac{516965,41 \frac{\text{€}}{\text{año}}}{12674,27 \frac{\text{L}}{\text{año}}} = 40,78 \frac{\text{€}}{\text{L}} \quad (114)$$

Según artículos y catálogos online consultados, se ha encontrado un rango de precios de venta del etanol, que se abarca desde los 135 € para el etanol que se considera puro al 100%, y hasta los 40€ que se encuentra el etanol de una pureza de 99,5%. Por lo que, viendo la calidad de nuestro etanol, cuya pureza es de 99,5%, , lo que nos cuesta producir el etanol y viendo otros precios de etanol con la misma calidad que el nuestro, se ha decido poner un precio de venta de 44€/L. El dinero obtenido con la venta del producto se muestra en la Tabla 35:

Tabla 35. Beneficios obtenidos de la venta de bioetanol

Producto			
bioetanol (kg/año)	Bioetanol (L/año)	precio (€/L)	Total (€/año)
10000.00	12674.27	44	557667.93

Por lo que por la venta del bioetanol se obtendrán 557667.93 €/año.

El flujo de caja entonces será la resta entre el dinero obtenido por la venta del ácido hialurónico y los costes de explotación:

$$\text{Flujo de caja} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = \text{Beneficios} - \text{Costes de explotación} \quad (115)$$

$$\text{Flujo de caja} \left(\frac{\text{€}}{\text{año}} \right) = 557667.93 - 516965.41 = 40702.53 \frac{\text{€}}{\text{año}} \quad (116)$$

Se va a considerar constante para todos los años que dure la instalación, en este caso 10.

5.3 VAN

Se va a calcular el VAN de los años en los que dure el proceso. Para ello los datos que se van a sustituir son:

- D_0 el desembolso inicial, corresponde al presupuesto de instalación
- F corresponde al flujo de caja
- t corresponde al periodo de tiempo que toque, en este caso cada vez será un año

- k es el tipo de interés que se le va a exigir a la inversión. Antes se ha dicho que el TIR óptimo se encuentra entre un 5% y un 100%. Por lo que se va a buscar el caso más desfavorable de estos dos, un 5%.
- n corresponde al número de periodos, 10 en este caso

$$VAN = -284024.59 + \frac{40702.53}{(1 + 0.05)^1} + \frac{40702.53}{(1 + 0.05)^2} + \dots + \frac{40702.53}{(1 + 0.05)^{10}} \quad (117)$$

$$VAN = 30269.52 \text{ €}$$

Como el $VAN > 0$, se puede decir que la inversión generará beneficios.

5.4 TIR

Como se ha explicado antes, es la tasa de descuento que hará que los cobros y los pagos sean iguales, por lo que genera un VAN igual a 0. Para calcular el TIR se sustituirá en su fórmula:

- D_0 el desembolso inicial, corresponde al presupuesto de instalación
- F corresponde al flujo de caja
- t corresponde al periodo de tiempo que toque, en este caso cada vez será un año
- n corresponde al número de periodos, 10 en este caso

Sustituyendo:

$$0 = -284024.59 + \frac{40702.53}{(1 + TIR)^1} + \frac{40702.53}{(1 + TIR)^2} + \dots + \frac{40702.53}{(1 + TIR)^{10}} \quad (118)$$

$$TIR = 7.14 \%$$

El valor del TIR calculado expresa que la tasa de rendimiento que se ha obtenido es mayor que la tasa de rentabilidad mínima que se le ha aplicado al VAN anteriormente, con lo que se puede deducir que el proyecto de inversión puede ser aceptado.

5.5 Pay-Back

Anteriormente, se ha explicado de qué se trata el pay-back o plazo de recuperación. Por medio de este sabemos el número de periodos (años) que se tardará en recuperar el dinero desembolsado al comiendo de la inversión.

$$\text{Payback} = \frac{I_0}{F} = \frac{284024.59}{40702.53} = 6.97 \text{ años} = 7 \text{ años} \quad (119)$$

Se puede afirmar que el desembolso inicial se recuperará totalmente en unos 7 años de los 10 que se espera que dure la instalación.

6 Diseño de la instalación

A continuación, en este apartado se va a mostrar un diseño aproximado de la planta realizado con el software simulador de procesos ProMax.

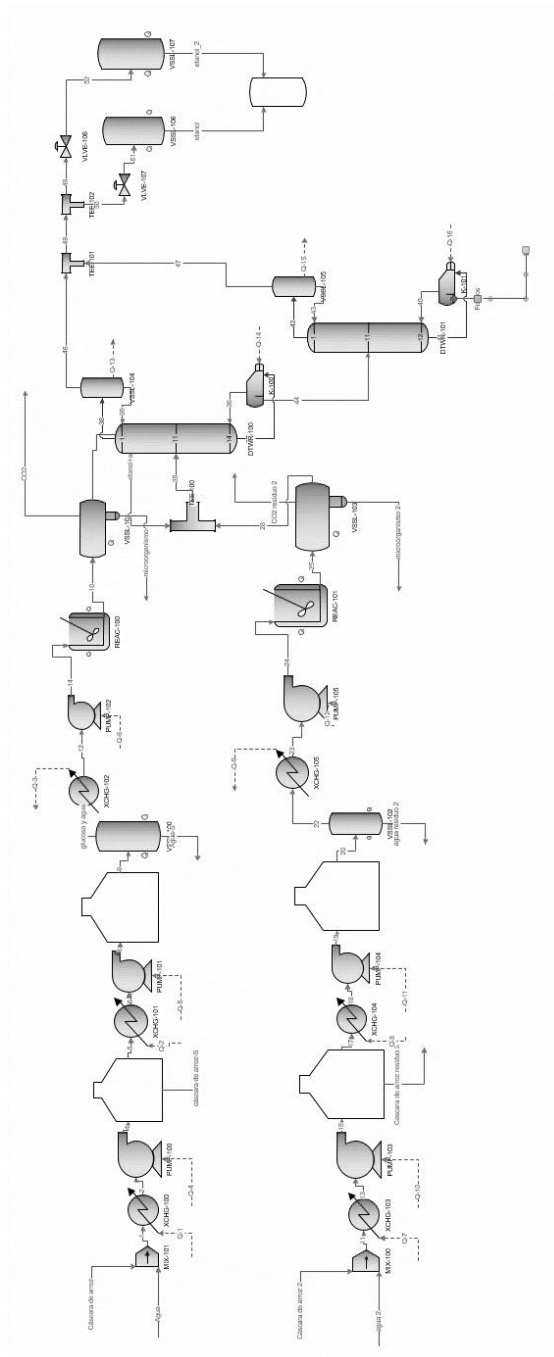


Ilustración 18. Diseño de la planta

En la Ilustración 18, podemos encontrar dos líneas de producción en las que ocurren los mismos procesos de forma paralela. A la misma vez en las dos líneas de producción se comenzará con los respectivos pretratamientos. Tras esto, la solución se separará de la cáscara de arroz para así acceder al proceso de hidrólisis ácida en el que se obtendrá la glucosa necesaria para la formación de bioetanol. A continuación, la solución de glucosa pasará por el evaporador para reducir el volumen de agua de la disolución y se introducirá junto el resto de las materias primas al fermentador. Cuando la temperatura de la disolución en el fermentador llegue a los 30 grados indicados para el microorganismo, se introducirá y se llevará a cabo el proceso. Finalizado el proceso, los microorganismos y el CO_2 se extraerán y la disolución de las dos líneas de producción se mezclan y se introducen en el destilador. Tras esto, el destilado de la primera columna pasará a los tamices moleculares, mientras que los fondos de esta pasaran a una segunda columna de destilación. El destilado de esta última columna de destilación se mezclará con el destilado de la primera y se introducirán en los tamices moleculares. El destilado se introducirá en la primera columna de tamices moleculares hasta que se sature, cuando esto ocurra la válvula de esta columna se cerrará y se abrirá la válvula de la segunda columna haciendo así que la mezcla etanol agua pasen por la segunda columna. Las columnas saturadas se someterán a un proceso de desorción en el que se utilizará la corriente de CO_2 para este procedimiento. Finalmente, una vez tratada la solución, el etanol al 99.5% se almacenará en un tanque para su envasado.

7 Conclusiones

Finalmente, este proyecto ha logrado cumplir con los objetivos que se habían planteado y se ha logrado el diseño de un proceso para la obtención de bioetanol a partir de la cáscara de arroz a nivel industrial. Se podría concluir que, durante la realización de este proyecto se han trabajado las siguientes competencias:

- A partir de la información que se ha ido buscando, encontrando y estudiando en artículos, libros, tablas y demás, se ha sido capaz de comparar, seleccionar y estudiar las condiciones, materias primas, procesos y equipos del proceso que se ha llevado a cabo.
- Se ha trabajado la aplicación de un escalado a partir de una planta piloto, utilizando reglas de similitud geométrica con el fin de poder extrapolar el proceso en cuestión escala industrial.
- Se ha llevado a cabo el dimensionado de un fermentador para obtener el mayor rendimiento de producción de bioetanol.
- Se ha estudiado y diseñado un proceso de purificación del bioetanol, en el que se ha conseguido dimensionar dos columnas de destilación y dos columnas de tamices moleculares, y definir el número de etapas del proceso de destilación.
- Se ha llevado a cabo un análisis económico del proceso a partir de los datos obtenidos de bibliografía y catálogos online, estimando su viabilidad mediante técnicas como el *VAN* y el *TIR*

En resumen, en este trabajo de fin de grado se ha llevado a cabo la integración de los conocimientos adquiridos durante los cursos impartidos en el grado, como lo son el estudio de bioproceso, diseño de destiladores o análisis de viabilidad económica de un proceso.

Finalmente, con el estudio realizado en este trabajo, se podría afirmar que resultaría rentable aplicar este proceso a una escala industrial, basándose en su rentabilidad. No obstante, los precios utilizados sobre todo en el equipamiento se deberán afinar más si se pretende aplicar con vistas a producir el producto industrialmente.

8 Bibliografía

- Abril, Alejandro. (2012). *Etanol a partir de biomasa lignocelulósica*. Valencia.
- Arellano Pérez Alberto Israel, Ríofrío López (2014). *Diseño y construcción de un deshidratador por absorción con tamices moleculares para la obtención de alcohol anhidro*. Riobamba-Ecuador.
- Baxter, Roberto (2008). Obtención de bioetanol a partir de desechos de arroz. *Animal Genetics*, 561-563.
- Buendía, Víctor Hugo (2013). *Obtención de azúcares por hidrólisis ácida y ensayos metanogénicos a partir de *Jatropha curcas* L. y *Pennisetum* sp.* Orizaba.
- Cristancho, Angie Patricia (2020). *Una revisión general de los procesos para la producción de bio etanol de segunda generación a partir de biomasa lignocelulosa*. Villavicencio: Universidad Santo Tomás.
- Edeh, Ifeanyichukwu (2021). Bioethanol Production: An Overview. En F. Inambao, *Bioethanol Technologies* (pág. 154). IntechOpen.
- Fernandes (2009). Effects of thermo chemical pre-treatment on anaerobic biodegradability and hydrolysis of lignocellulosic biomass. *Bioresources Technology*.
- Guoce Yu (2010). Pretreatment of Rice Straw by a Hot-Compressed Water. *Appl Biochem Biotechnol*, 539-551.
- Hairui Ji (2012). Characteristics of an Immobilized Yeast Cell System Using Very High Gravity for the Fermentation of Ethanol. *Appl Biochem Biotechnol*, 21-28.
- Inés del Campo. (2006). Diluted acid hydrolysis pretreatment of agri-food wastes for bioethanol production. *ScienceDirect*, 214-221.
- Iberf (6 de agosto de 2020). *Iberf*. Obtenido de <https://agro.iberf.es/siembra-arroz-espana/#:~:text=Espa%C3%B1a%20produce%20m%C3%A1s%20de%20720.000,marismas%20de%20la%20Comunidad%20Valenciana>.
- José Luis Montañez (2011). Fermentación de los fructanos del Agave tequilana Weber Azul por *Zymomonas mobilis* y *Saccharomyces cerevisiae* en la producción de bioetanol. *Información tecnológica*, 3-14.

- Juan Nicolás Muñoz, C. A. (2021). *Propuesta de una estrategia de implementación para la producción de etanol partiendo de cascarilla de arroz en Colombia*. Bogotá D.C: Fundación Universidad de América.
- Julian Quintero (2011). Production of Bioethanol from Agroindustrial Residues as Feedstocks. En *Biofuels: Alternative Feedstocks and Conversion Processes* (págs. 251-282). Manizales, Colombia.
- Mohammad Moneruzzaman Khandaker, U. A. (2021). Bio-Ethanol Production from Fruit and Vegetable Waste by Using *Saccharomyces cerevisiae*. En F. Inambao, *Bioethanol Technologies*. IntechOpen <https://doi.org/10.5772/intechopen.94358>.
- Monroy Antonio*† (2017). Generación de bioetanol como combustible alternativo a partir de compuestos. *Revista de Energía Química y Física*, 49-57.
- Morales, Hector Fabio (2014). *Producción de bioetanol a partir de material lignocelulósico de moringa olefina*. Bogotá D.C., Colombia.
- Mustafat, Balat (2011). Production of bioethanol from lignocellulosic materials via the biochemical. En B. Mustafat, *Energy conversion and Management*, (págs. 858-875).
- Parameswaran Binod (2011). *Hydrolysis of Lignocellulosic Biomass for Bioethanol Production*. In *Biofuels*. Burlington,: Biofuels: Alternative feedstocks and conversion processes. Academic Press,.
- Perales, Carla Arellano (2015). “*Obtención de bioetanol a partir de materiales lignocelulósicos sometidos a hidrólisis enzimática*”.
- Picataggio, Zhang (1994). *Development of genetically engineered microorganisms for ethanol production. Enzymatic conversion of biomass for fuels production*. Washington, DC: American Chemical Society symposium series 566.
- Sánchez Riaño, Gutiérrez Morales, , & II Muñoz Hernández (2009). Producción de bioetanol a partir de subproductos agroindustriales lignocelulósicos. *CIENCIAS - QUÍMICA*, 60-91.
- Siti Hajar Mohd Azhar,. (2017). Yeasts in sustainable bioethanol production: A review. *Biochemistry and Biophysics Reports*, 52-61.
- Timothy (2021). Production of Bioethanol—A Review of Factors Affecting. *Fermentation*, 18.
- Valverde, (2007). Análisis Comparativo De Las Características Fisicoquímicas De La Cascarilla De Arroz. *Scientia et Technica*, 255-260.

Vázquez, Aurora Garea (2017). *Estudio de la obtención de bioetanol a partir de diferentes tipos de biomasa lignocelulósica*.

Voegele, Erín (08 de Octubre de 2018). *Ethanol producer magazine*. Obtenido de <https://ethanolproducer.com/articles/15673/iea-predicts-growth-in-global-ethanol-production-through-2023>

Yiqing, Muían (2012). Anaerobic digestion of poplar processing residues for methane production after alkaline treatment. *Bioresource Technology*, 347-352.

9 ANEXOS

9.1 ANEXO SCRIPT PRINCIPAL

```

%% ----- DATOS DE EQUILIBRIO -----
datos_EQ_etanol_agua_1atm_chemsep;

PMA=46.07;PMB=18.02;           %pesos moleculares

%% ----- DATOS OPERACION -----

%Alimento
F.x=0.01; F.q=1;
F.xm=(F.x*f.PMA)/(F.x*f.PMA+(1-F.x)*f.PMB); %fraccion masica
F.pm=F.x*f.PMA+(1-F.x)*f.PMB; %peso molecular promedio
F.F=(9.235)/(3600*f.pm);           % kmol/s base de cálculo, la produccion anual
actual en una industria ronda las 21500 al año, lo q q equivale a 0,0213kmoles/ segundo o consumo
% se introduce una mezclaa liquida azeotropica rica en acetato con metanol y agua con un 44% en
metanol con un pto de ebullicion de 62,3°c
F.T=f.Tx(F.x); % Temperatura plato alimentacion
F.den=f.denL(F.xm,F.T); %densidad plato alimentacion
F.Q=(F.F*f.pm)/(F.den);%Caudal volumetrico plato alimentacion
F.vis=f.visL(F.x,F.T);%viscosidad plato alimentacion

%Destilado
D.x=0.90;
D.T=f.Tx(D.x);

%Residuo
W.x=0.003;
W.T=f.Tx(W.x);

R1=118/94;           % dato extrado a raiz de la patente se
devuelven al plato mas alto 118 partes y se destilan 94 de metanol
%% a) BALANCE DE MATERIA GLOBAL

D.D=F.F*((F.x-W.x)/(D.x-W.x));
W.W=F.F-D.D;
fprintf('RESULTADOS \n');
fprintf('Destilado D = %.3e kmol/s \n',D.D);
fprintf('Residuo W = %.3e kmol/s \n',W.W);

%% b) RELACION DE REFLUJO MINIMA Y NUMERO MINIMO DE ETAPAS

% REFLUJO MINIMO
Rmin =reflujo_min_MT_est(F,D,f);
fprintf('Reflujo mínimo \tRmin = %.3f \n',Rmin);

```

```

NETmin =etapas_min_MT_est(1,F,D,W,f);
fprintf('Número mínimo de etapas, NETmin = %d\n',NETmin);

%% c) NUMERO DE ETAPAS ideales (No es necesario)

% R=[1.847*Rmin]; % el 1,847 sale de diividir el reflujo que tenemos como
dato entre el Rmin, obteniendo asi la r=1,847, de R=r^Rmin
% for i=1:length(R)
% r=R(i);
% [NET(i) NF(i) x y] =etapas_MT_est(1,r,F,W,D,f);
% xW(i)=x(end);
% NP=NET-1; %El numemro de platos sera el de etapas menos 1
% end

%% c) NUMERO DE ETAPAS REALES

P=101325;
%
% R=[1.001 1.005 1.007 1.009 1.05 1.10 1.15 1.20 1.25 1.45 1.65 1.847 2.6
% 3.34 3.50 4.09 5 6];
R=[1.1 2 3.5];
R=R*Rmin;
for i=1:length(R)

r=R(i);
[NET(i) NF(i) x yr(i) yr(i)] =etapas_MT_EML(1,r,F,W,D,f);
xW(i)=x(end);
NP(i)=NET(i)-1;%El numemro de platos sera el de etapas menos 1
N(i)=NET(i);

end

fprintf('Número real de etapas, NET = %d\n',NET);

figure()
hold on %como varia el QC con el reflujo
plot(R, NET, '-r') %a mas reflujo mas calor
xlabel('R');ylabel('Nº Etapas reales');

for i=1:length(R)
%% POTENCIAS O CARGAS TERMICAS
% condiciones condensador

%Para poder determinar las cargas termicas primero debemos determinar las

```

```

%entalpias de las corrientes del sistema
D.h=f.hL(D.x,f.Tx(D.x));           % entapia del liquido despues de salir del condensador
HG1=f.hV(D.x,f.Ty(D.x));           %Entalpia de la corrinte que entra en el condensador total,

%esta se encuentra toda en estado vapor por lo que su composicion sera la misma
%que la del destilado en estado liquido
QC=D.D*(R+1)*(HG1-D.h);           %Carga termica del condensador kW

% Caracteristicas del agua fria
T_salida=(35+273.15);T_entrada=(25+273.15);
den_salida=994.08;den_entrada=998.29;   % densidad del agua, kg/m3
den_prom=(den_salida+den_entrada)/2;

cp_agua=75.4;                       %capacidad calorifica del agua kJ/kmol·K

%% condiciones calderin
% Caracteristicas del vapor vivo
% El vapor vivo de calefacción a 2.5 bar abs tiene un calor de vaporización
W.h=f.hL(W.x,f.Tx(W.x));
F.h=f.hL(F.x,f.Tx(F.x));

% realizando un balance de energia en el sistema sin fugas.
QB=QC+D.D*D.h+W.W*W.h-F.F*F.h;   %Carga termica del calderín obtenida por el balance de
materia total

lambda_vapor=2693*18;               % kJ/kmol
mvapor=QB/(lambda_vapor);           % kmol/s

end

%% Representacion grafica potencia

% potencia conjunta de calderín y condensador

QT=QB+QC;                           %kj/s o kW

figure()
hold on                               %como varia el QC con el reflujo
plot(R, QC, '-r')                     %a mas reflujo mas calor
plot(R, QB, '-g')
xlabel('R');ylabel('Cargas termicas');
legend('Q_c_o_n_d_e_n_s_a_d_o_r','Q_c_a_l_d_e_r_i_n');

% Representaciones gráficas Cargas del calderin y condensador

figure()
hold on
bar(R,NET,'b');
xlabel('R');ylabel('N_e_t_a_p_a_s');
figure()

```



```

hold on
bar(R,QT,'b');
bar(R,QB,'y');
bar(R,QC,'r');
xlabel('R');ylabel('Q, kW');
legend('QT','Q_c_a_l_d_e_r_i_n','Q_c_o_n_d_e_n_s_a_d_o_r');
plot(R,QB,'sk');plot(R,QC,'sk');
plot(R,QT,'sk');
for i=1:length(R)
rendQ(i)=(QT(i)-QT(2))/QT(2);
rendET(i)= (NET(i)-NET(2))/NETmin;
end

%% Para acabar pasaremos las unidades de los flujos a kg/h en el caso del
% vapor de agua para el calderin y m3/s para el agua refrigerante en el caso del condensador , y
comentaremos un poco las graficas obtenidas

%Flujo de agua refrigerante
magua=QC/(cp_agua*(T_salida-T_entrada)); %kmol/s
fprintf('Flujo de agua refrigerante= %.4f m3/s\n',magua*18/den_prom);

for i=1:length(R)
fprintf('Flujo de vapor de agua para el calderin, mvapor%d= %.2f kg/h\n',i,mvapor(i)*18*3600);
%pasamos el flujo de vapor de kmol/s a kg/h
end
texto=sprintf('Potencia del condensador QC= %.2e kW\n',QC);
disp(texto);

% como varia el reflujo con el numero de etapas, aqui se ve claramente como
% al aumentar el reflujo hasta el infinito, la linea de operacion se acerca
% cada vez mas a la linea o diagonal, , es
% decir a mayor R, el numero de etapas disminuye , hasta llegar a Netmin

%Contrariamente a menor reflujo, llega el punto en el que llegamos a lo que
%conocemos como rmin, en este caso la linea de operacion corta la
%interseccion de la linea de alimentacion con la de equilibrio lo que
%llevaria a tener etapas infinitas
% hold on
% plot(R./(1+R),NET./(1+NET),'-s');
% xlabel('R');ylabel('N_e_t_a_p_a_s');
figure() % como varia el reflujo en funcion de los caudales, como vemos la variacion es muy parecida
tanto para el calderin como para el condensador
hold on
plot(R./(1+R),QC,'-r');
plot(R./(1+R),QB,'ob');
ylabel('Carga termica');xlabel('Variacion R ');

% close all %descomentar para ver graficas de costes
for i=1:length(R)

```

```

%% -----Diametro platos perforados y costes -----

DPE.delta_P=0.100;           % perdida de carga por plato, m
DPE.dO=3;                    % Estimar diámetro orificio en mm
DPE.t=0.5;                   % Estimar espaciado entre platos,m 0.5 D>1 m 0.6 1<D<3
0.75 D>3
DPE.rWT=0.7;                 % Relación del derramadero r=W/DT
% DPS.n=DPE.n;               % número del plato
T=f.Tx(xr(i));
% Temperaturas en funcion del reflujo para el ultimo plato
% Se supone que la alimentacion esta en su punto de burbuja, y que esta
% saturado, no se requiere condensacion para calentar la alimentacion de
% forma que V = V y L=F+L0 ver pag 562 y 565
L0.L0=D.D.*R(i);
V(i)=(D.D.*R(i))+D.D;
L(i)=F.F+(D.D.*R(i));

[DPS(i,err)]=calcular_diametro_plato(P,T,V(i),yr(i),L(i),xr(i),DPE,f); %xr(i) y yr(i) es la composicion en
el ultimo plato a cada reflujo

L0.x=D.x;                    % reflujo, dado que estamos
realizando el ejercicio por el metodo de McCabe thiele, consideremos que la fraccion de destilado es la
misma que la del reflujo
L0.xm=(L0.x*f.PMA)/(L0.x*f.PMA+(1-L0.x)*f.PMB);
L0.pm=L0.x*f.PMA+(1-L0.x)*f.PMB;
L0.T=f.Tx(L0.x); L0.den=f.denL(L0.xm,L0.T); L0.Q=(L0.L0*L0.pm)/(L0.den);
L0.vis=f.visL(L0.x,L0.T);

end

for i=1:length(R)
%% -----Valoracion economica -----
% %% Datos para el calculo de costes

% -----Argumentos de entrada-----

% C estructura de datos de la columna
C(i).NETR=NET(i);
C(i).altura=(C(i).NETR)*DPE.t./0.85; % 15% para cabeza y
fondos DPE.t linea 15 script diametro
altura(i)=C.altura;

```

```

C(i).alturaF=(C(i).NETR-NF(i))*DPE.t+0.075*C(i).altura;
alimentación
C(i).POTB=QB(i);
C(i).POTC=QC(i);
kW
C(i).TCAL=f.Tx(W.x);
C(i).TCON=f.Tx(D.x);
condensador,K
%% Reflujo optimo
fprintf('Diametro del plato = %.3f m \n ',DPS.DC);
fprintf('Altura de la columna = %.3f m \n ',C.altura);

end

```

% entrada

% Potencia del calderin, kW

% Potencia del condensador,

% temperatura del calderin, K

% temperatura del

9.2 ANEXO DATOS DE EQUILIBRIO

```

clc
clear all
close all
P=101325; %Presion (Pa)
f.PMB=18.02; f.PMA=46.07;

```

```

Txy=[373.5920 0.0000 0.0000
369.0670 0.0496 0.3335
365.8930 0.0964 0.4827
363.5770 0.1404 0.5662
361.8370 0.1820 0.6191
360.4940 0.2214 0.6555
359.4380 0.2587 0.6819
358.5890 0.2941 0.7021
357.8970 0.3277 0.7179
357.3220 0.3597 0.7308
356.8370 0.3902 0.7416
356.4220 0.4192 0.7507
356.0610 0.4470 0.7587
355.7440 0.4735 0.7659
355.4600 0.4988 0.7723
355.2040 0.5231 0.7783
354.9700 0.5464 0.7839
354.7530 0.5687 0.7892
354.5510 0.5901 0.7943
354.3610 0.6107 0.7992
354.1820 0.6305 0.8041
354.0120 0.6495 0.8089

```

353.8490	0.6679	0.8137
353.6930	0.6856	0.8185
353.5440	0.7026	0.8233
353.4010	0.7191	0.8282
353.2630	0.7349	0.8332
353.1320	0.7503	0.8382
353.0060	0.7651	0.8434
352.8850	0.7795	0.8487
352.7710	0.7934	0.8540
352.6630	0.8068	0.8596
352.5620	0.8198	0.8652
352.4670	0.8324	0.8711
352.3800	0.8447	0.8770
352.3010	0.8566	0.8832
352.2290	0.8681	0.8895
352.1660	0.8793	0.8960
352.1130	0.8902	0.9027
352.0690	0.9007	0.9096
352.0350	0.9110	0.9166
352.0130	0.9210	0.9239
352.0020	0.9307	0.9314
352.0040	0.9402	0.9392
352.0180	0.9494	0.9471
352.0470	0.9584	0.9553
352.0910	0.9671	0.9637
352.1510	0.9757	0.9724
352.2280	0.9840	0.9813
352.3230	0.9921	0.9905
352.4370	1.0000	1.0000

};

TEQ=Txy(:,1);xEQ=Txy(:,2);yEQ=Txy(:,3);

% crear funciones de equilibrio

f.y=@(x) interp1(xEQ,yEQ,x,'PCHIP');

f.x=@(y) interp1(yEQ,xEQ,y,'PCHIP');

f.Tx=@(x) interp1(xEQ,TEQ,x,'PCHIP');

f.Ty=@(y) interp1(yEQ,TEQ,y,'PCHIP');

% cálculo de H-1-x-Y

% Datos simplificados desde Chemsep

Tref=351;

TbB=383.79; TbA=353.24;

% capacidades calorificas kJ/kmol/K

f.cVB=@ (T) 124.38+(124.38-134.849) / (TbA-TbB)*(T-TbA);

f.cLB=@ (T) 173.168+ (173.168-183.936)/ (TbA-TbB)*(T-TbA);

f.cVA=@ (T) 99.498+ (99.498 -108.415)/ (TbA-TbB)*(T-TbA);

f.cLA=@ (T) 149.473+ (149.473-157.273) / (TbA-TbB)*(T-TbA);

% calores latentes de vaporización kJ/kmol

lambdaA=3.5112e4;

lambdaB=3.9453e4;

% datos calor de mezcla a Tref, kJ/mol no procede

fhD=@ (x) 0;

```

% funciones de entalpia
% h=0 Metanol Liquido puro a la temperatura Tref
f.hL=@ (x,T) (f.cLA (T).*x+f.cLB (T).*(1-x)).*(T-Tref);
f.hV=@ (y,T) lambdaA*y+lambdaB*(1-y)+(f.cVA(T).*y+f.cVB(T).*(1-y)).*(T-Tref);

H=figure();
hold on
grid on
line([0 1],[0 1],'color','k');
plot(xEQ,yEQ,'r');
x=linspace(0,1,50);
y=f.y(x);
T=f.Tx(x);
plot(x,y);

savefig(H,'datos_EQ_etanol_agua_1atm_chemsep');
%% Propiedades de transporte

% ETANOL

f.visVA=@(T)1.2467E-07*power(T,0.7862) ./ (1 + 76.034./T + -2017.3./power(T,2));
f.visLA=@(T) exp(8.061+774.76./T+-3.0701.*log(T)+-4.3408E-09.*power(T,2));
f.denLA =@(T) (1.3539./ 0.24957.^(1 + (1 - T/515.66).^0.22099))*f.PMA; % Eq 105
f.sigLA=@(T) -0.078773+ exp( 19.874./T + -2.3731+0.00067227.*T + -0.0000021132.*T.^2 );

% AGUA

% f.visVB=@(T) 0.0000034514*power(T,0.35236) ./ (1 + 732.29./T + -3982.4./power(T,2));
% f.visLB=@(T) exp(16.428+-219.29./T+-4.124.*log(T)+6.0568E-07.*power(T,2));
f.denLB =@(T) (0.78926./ 0.24295.^(1 + (1 - T/523.26).^0.25762))*f.PMB; % Eq 105
% f.sigLB=@(T) -0.025331+ exp( 12.715./T + -2.6443 + -0.0005937.*T + -0.0000027669.*T.^2 );
f.visVB=@(T) 7.002327E-08*power(T,0.934576) ./ (1 + 195.6338./T -13045.99./power(T,2));
f.visLB=@(T) exp(-133.7+6785.7./T+18.47.*log(T)+-0.000014736.*power(T,2));
% f.denLB =@(T) (32.51621./ -3.213004.^(1 + (1 - T/7.92411).^~7.359898))*f.PMA;
f.sigLB=@(T) -0.031819+ exp( 167.09./T + -3.6781+ 0.0053717.*T + -0.0000084188.*T.^2 );

% MEZCLAS
% Difusividad en fase gas. Método de Fuller
% A-C2H6O B-H2O
vA=2*16.5+6*1.98+5.48;
vB=2*1.98+5.48;
f.DABV=@(p,T)(1e-7*(T^1.75)*((1/f.PMA+1/f.PMB)^0.5)/P/1.01325e5)/((vA^(1/3)+vB^(1/3))^2);

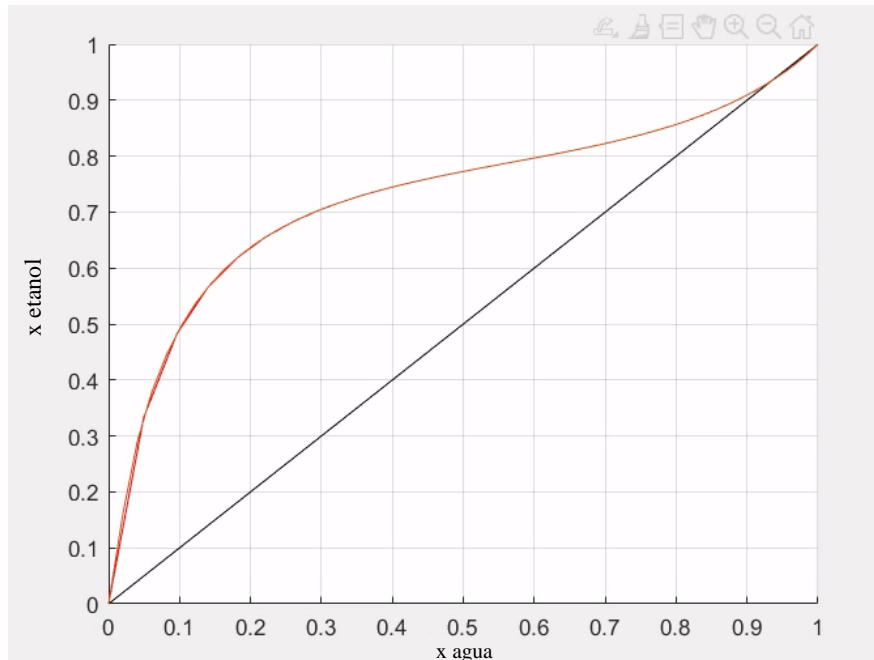
% densidad de la mezcla
f.denL =@(xm,T) 1./(xm./f.denLA(T)+(1-xm)./f.denLB(T));
% viscosidad de la mezcla
f.visV=@(y,T) f.visVA(T).*y+f.visVB(T).*(1-y);
f.visL=@(x,T) f.visLA(T).*x+f.visLB(T).*(1-x);
% difusividad en fase líquida. Método Wilke-Chang
fi=1;
vAL=2*14.8+6*3.7+11;

```

```

DABL_298=(7.4e-12*(298.15)*((fi*f.PMB)^0.5))/(f.visLB(298.15)/1000*(vAL^0.6));
f.DABL=@(T) 7.4e-12*(T)*((fi*f.PMB)^0.5)/(f.visLB(T)/1000*(vAL^0.6));
% Tensión superficial del liquido
f.sigL=@(x,T) x.*f.sigLA(T)+(1-x).*f.sigLB(T);

```



Gráfica 2. Diagrama de equilibrio etanol-agua

9.3 ANEXO Rmin

```

function Rmin = reflujo_min_MT_est(F,D,f)
xmin=fzero(@(x) (F.q-1)*f.y(x)-F.q*x+F.x,F.x);
ordenada=D.x-((D.x-f.y(xmin))/(D.x-xmin))*D.x;
Rmin=D.x/ordenada-1;

```

end

9.4 ANEXO NÚMERO DE ETAPAS MÍNIMAS

```

function NET = etapas_min_MT_est(sg,F,D,W,f)
i=1;
y(i)=D.x;
x(i)=f.x(y(i));
while(x(i)>W.x)
    i=i+1;
    y(i)=x(i-1);
    x(i)=f.x(y(i));
end
NET=i;

```

```

sg=0;

if sg>0

% Salida gráfica de la operación de destilación continua por etapas de
% equilibrio utilizando el método de McCabe Thiele

figure()
z=linspace(0,1,50);
hold on
%ponemos las etiquetas principales del gráfico x-y
texto=sprintf('Número mínimo de etapas ideales= %d',NET);
ylabel('y, fracción molar');xlabel('x, fracción molar');
plot(z,f.y(z))

%dibujamos la diagonal
line([0 1],[0 1],'color','r');

%puntos clave
plot(D.x,D.x, '.');
plot(W.x,W.x, '.');
plot(F.x,F.x, '.');
i=1;
line([D.x x(i)],[D.x y(i)]);plot(x(i),y(i),'o');
for i=2:NET
line([x(i-1) x(i-1)],[y(i-1) y(i)], 'LineStyle','--','Color','k');
line([x(i-1) x(i)],[y(i) y(i)], 'LineStyle','--');plot(x(i),y(i),'o');
plot(x(i),y(i),'o');
end
end
end

```

9.5 ANEXO NÚMERO DE ETAPAS IDEALES

```

function [NET NF x y] =etapas_MT_est(sg,R,F,W,D,f)
xint=fzero(@(x) ((F.q*x-F.x)*(R+1)-(R*x+D.x)*(F.q-1)),F.x);
yint=(R*xint+D.x)/(1+R);
% definimos la linea de operacion de agotamiento con su pendiente
pendW=(yint-W.x)/(xint-W.x);

i=1;
y(i)=D.x; % valor mas alto, coincide con la fraccion del destilado
x(i)=f.x(y(i));
while(x(i)>W.x)
i=i+1;
if x(i-1)>xint
y(i)=R*x(i-1)/(R+1)+D.x./(R+1); % Zona de enriquecimiento
NF=i;

```

```

else
y(i)=W.x+pendW*(x(i-1)-W.x); % Zona de agotamiento
end

x(i)=f.x(y(i));
end
NET=i;

% sg=1;

if sg>0

%Salida gráfica de la operación de destilación continua por etapas de
%equilibrio utilizando el método de McCabe Thiele

figure()
z=linspace(0,1,50);
hold on
%ponemos las etiquetas principales del gráfico x-y
texto=sprintf('Número de etapas ideales= %d',NET);
ylabel('y, fracción molar');xlabel('x, fracción molar');
plot(z,f.y(z));

%dibujamos la diagonal
line([0 1],[0 1],'color','r');

%puntos clave
plot(D.x,D.x, '.');
plot(W.x,W.x, '.');
plot(F.x,F.x, '.');
%representacion de las lineas de operación
ordenada0=D.x/(R+1);
line([D.x 0],[D.x ordenada0],'Color','k');
ycambio=xint*R/(R+1)+ordenada0;
line([xint W.x],[yint W.x],'Color','k');
%representacion de la linea de alimentación
line([xint F.x],[yint F.x],'Color','k');

i=1;
line([D.x x(i)],[D.x y(i)]);plot(x(i),y(i),'.');
for i=2:NET
line([x(i-1) x(i-1)],[y(i-1) y(i)],'LineStyle','--','Color','m');
line([x(i-1) x(i)],[y(i) y(i)],'LineStyle','--','Color','m');
plot(x(i),y(i),'.');
end
end

end

```


9.6 ANEXO NÚMERO DE ETAPAS REALES

```

function [NET NF x yr] =etapas_MT_EML(sg,R,F,W,D,f)
xint=fzero(@(x) ((F.q*x-F.x)*(R+1)-(R*x+D.x)*(F.q-1)),F.x);
yint=(R*xint+D.x)/(1+R);
% definimos la linea de operacion de agotamiento con su pendiente
pendW=(yint-W.x)/(xint-W.x);

EML=0.7; %Eficacia de murphree basada en la corriente liquida
i=1;
y(i)=D.x; % valor mas alto, coincide con la fraccion del destilado
xeq(i)=f.x(y(i));
x(i)=D.x-EML*(D.x-xeq(i));
while(x(i)>W.x)
    i=i+1;
    if x(i-1)>xint
        y(i)=R*x(i-1)/(R+1)+D.x./(R+1); % Zona de enriquecimiento
        xeq(i)=f.x(y(i));
        x(i)=x(i-1)-EML*(x(i-1)-xeq(i));

    NF=i;
    else
        y(i)=W.x+pendW*(x(i-1)-W.x); % Zona de agotamiento
        xeq(i)=f.x(y(i));
        x(i)=x(i-1)-EML*(x(i-1)-xeq(i));
    end

% x(i)=f.x(y(i));
end
NET=i;
xr=x(i-1);
yr=y(i-1);

% sg=1;

if sg>0

%Salida gráfica de la operación de destilación continua por etapas de
%equilibrio utilizando el método de McCabe Thiele

figure()
z=linspace(0,1,50);
hold on
%ponemos las etiquetas principales del gráfico x-y
texto=sprintf('Número de etapas ideales= %d',NET);
ylabel('y, fracción molar');xlabel('x, fracción molar');
plot(z,f.y(z));

%dibujamos la diagonal
line([0 1],[0 1],'color','r');

```

```

%puntos clave
plot(D.x,D.x, '.');
plot(W.x,W.x, '.');
plot(F.x,F.x, '.');
%representacion de las lineas de operación
ordenada0=D.x/(R+1);
line([D.x 0],[D.x ordenada0],'Color','k');
ycambio=xint*R/(R+1)+ordenada0;
line([xint W.x],[yint W.x],'Color','k');
%representacion de la linea de alimentación
line([xint F.x],[yint F.x],'Color','k');

i=1;
line([D.x x(i)],[D.x y(i)];plot(x(i),y(i),'.');
for i=2:NET
line([x(i-1) x(i-1)],[y(i-1) y(i)],'LineStyle','--','Color','m');
line([x(i-1) x(i)],[y(i) y(i)],'LineStyle','--','Color','m');
plot(x(i),y(i),'.');
end
end

end

```

9.7 ANEXO CÁLCULO DE DIÁMETRO DE PLATOS

```
function [DPS,err]=calcular_diametro_plato(P,T,V,y,L,x,DPE,f)
```

```
% Archivo para el diseño de platos perforados.
```

```
% Argumentos de entrada
```

```
% P, presión, Pa
```

```
% T, temperatura, K
```

```
% V, flujo molar de vapor, kmol/s
```

```
% y, fracción molar del vapor
```

```
% L, flujo molar de líquido, kmol/s
```

```
% x, fracción molar del líquido x?
```

```
% DPE, estructura de datos estimados del plato
```

```
DPE.delta_P=0.100; % pérdida de carga por plato, m
```

```
DPE.dO=3; % Estimar diámetro orificio en mm
```

```
DPE.t=0.5; % Estimar espaciado entre platos,m 0.5 D>1 m 0.6 1<D<3 0.75 D>3
```

```
DPE.rWT=0.7; % Relación del derramadero r=W/DT
```

```
% f, estructura de datos y funciones de equilibrio y propiedades de
```

```
% transporte
```

```

% Argumentos de salida
% DPS, estructura de dimensiones del plato
% err, vector de codigos de los tres posibles errores

%% PROPIEDADES -----
%Argumentos entrada

% Propiedades de los fluidos:

MV=y*f.PMA+(1-y)*f.PMB;    % peso molecular promedio del gas
Vm=V.*MV;                  % flujo másico del gas
den_V=P.*MV./(8314*T);     % densidad del gas (kg/m3)

ML=y*f.PMA+(1-y)*f.PMB;    % peso molecular promedio del líquido
Lm=L.*ML;                  % flujo másico del gas (kg/s)
xm=y*f.PMA./(y*f.PMA+(1-y)*f.PMB);

vis_V= f.visV(y,T);        % viscosidad del vapor, kg/m s
vis_L=f.visL(x,T);        % viscosidad del líquido, kg/m·s
den_L = f.denL(xm,T);     % densidad del líquido, kg/m3
sig_L= f.sigL(x,T);       % tensión superficial del líquido,P·m

%% DISEÑO DEL PLATO -----
err=[0 0 0];
%% CALCULO DIAMETRO. CONDICIONES DE INUNDACION
% dO, diámetro de orificio (m)
p=3*DPE.dO;               % distancia entre centros de perforaciones,mm
                          % 2.5 a 5 diámetros de los orificios
rLV=(Lm./Vm).*power(den_V./den_L,0.5);
AOAA=0.907.*power(DPE.dO/p,2); % relación de área de perforaciones a área activa

% Cálculo de los parámetros del coeficiente de inundación

if rLV<0.1 rLV=0.1; end
if AOAA>=0.1
    alfa=0.0744*DPE.t+0.01173;
    beta=0.0304*DPE.t+0.015;
else alfa=(0.0744*DPE.t+0.01173)*(5*AOAA+0.5);
    beta=(0.0304*DPE.t+0.015)*(5*AOAA+0.5);
end

CF=(alfa.*log10(1./rLV)+beta).*(sig_L/0.02).^0.2;% coeficiente de inundación
% velocidad superficial del líquido en condiciones de inundación
vGF=CF.*power((den_L-den_V)./den_V,0.5);

% Diámetro de la columna
% El factor principal que determina el diámetro de la columna es el caudal
% de vapor. La velocidad del vapor debe estar por debajo de la que causaría
% un arrastre excesivo de líquido o una caída de presión alta.

```

```

vG=0.85*vGF;    % velocidad del gas operativa suponiendo el 85%
AN=Vm./(den_V.*vG); % Area para el paso del gas

% Relación del derramadero reW=W/DT y area ocupada por el derramadero
% a partir de la relación de la distancia del derramadero al centro, rWT*DT,
% igual a 0.7;
[reW pArea]=relacion_derramadero(DPE.rWT);
AC=AN/(1-pArea); % Area de la columna (m)
DC=sqrt(4*AC/pi); % Diametro de la torre

% Diametro de la torre corregido utilizando tubos normalizados varían de
% 152 mm a 3000 mm (6" a 120").

for i=6:6:236
    % Aproximación al diametro standar hasta 236 in (6000 mm)
    if DC*100/2.54<=i
        DC=i*2.54/100; break
    end
end
%% Diseño provisional
% Comprobar el lloriqueo (check weeping)

LW=DC*DPE.rWT;    % Longitud del derramadero
AC=pi*DC^2/4;    % área de columna corregida, m2
AD=AC*pArea;    % area del derramadero

% zonas no perforadas para soporte y distribución de líquido
% diseño de acuerdo con el esquema de la figura 6.14 Treybal

e_soportes=40e-3;    % espacio para de soportes circular(m)
e_distribucion=50e-3; % espacio para distribución (m)

% Area soportes y zona de distribución:
LD=(asin(DPE.rWT)*2)*DC/2; % Longitud de la cuerda del vertedero
Area_sop_dis=(2*LW+DC+2*reW*DC)*e_distribucion+pi*DC*e_soportes;
% restando los solapes
Area_sop_dis=Area_sop_dis-3*e_distribucion*e_distribucion...
-6*e_distribucion*e_soportes-2*LD*e_soportes;

AA=AC-2*AD-Area_sop_dis; % área activa
AO=AOAA/AA;    % Area de orificios

%% ANALISIS DEL FLUJO VOLUMETRICO ESPECIFICO (q/W)
% Se ha de cumplir que q/W < 0.015 m3/(m*seg)
% fprintf('Diámetro= %.4f\n',DT);
q=Lm./den_L;

if q/LW <0.015
    % fprintf('Se cumple la condición. q/W<0.015\n');
else
    % fprintf('Se debe recalcular un valor mayor de LW\n');

```

```

err(1)=1;
end

%% Altura del derramadero hW.
% Se recomienda un valor de h1+hw comprendido entre 0.1 m y 0.05 m
hW=50; % mm líquido
% Cresta líquida sobre el vertedero, hOW
hOW=750*power(Lm./(den_L*LW),2/3);% mm líquido
% con la velocidad de líquido al 70%
hOW_min=750*power(Lm*0.7./(den_L*LW),2/3);% mm líquido
% Tasa de lloriqueo
hLL=hW+hOW_min;
K2=-9.90E-08*(hLL).^4+2.98E-05*(hLL).^3-3.49E-03*(hLL).^2+2.06E-01*(hLL)+2.54E+01;
uOmin=(K2-0.9*(25.4-DPE.dO))./den_V.^0.5;
uOa=0.7*Vm./(den_V.*AO);
uO=uOa;

if uOa<uOmin
    AO=AO*uOa./(1.1*uOmin);
    uO=Vm./(den_V*AO);
end

%% CALCULO DE LA PERDIDA DE CARGA GLOBAL
% Caída de presión en seco, hD
ahap=AO/AA;
% se toma una relación espesor del plato lp/dO de 0.6
lp=0.6*DPE.dO;
k0=0.7+((0.7-0.78)/(5-15))*(ahap*100-5);
hD=(51*power(uO./k0,2).*den_V./den_L);

% Caída de presión residual, hR
hR=(12.5E3./den_L);

% Caída de presión total
ht=hW+hOW+hD+hR;

% Caída de presión derramadero

p_V=(hW-10)/1000; % Paso para el líquido en el vertedero, (m)
ADA=p_V*LW; % Area del faldon del vertedero (m2)
Am=min(ADA,AD);

hDC=166*power(q/Am,2);
% Retroceso del vertedero,
hB=hW+hOW+ht+hDC;

%

%% ANALISIS DE LAS PERDIDAS DE PRESION GLOBALES
% Se ha de cumplir que La suma de caídas de presión
% debe ser inferior al 50% de la separación entre platos t

if hB <=(DPE.t*1000+hW)/2

```

```
% fprintf('Se cumple la condición. Suma_h=h1+h3+hW <t/2\n');
else
% fprintf('No se cumple la condición. Se debe recalcular un valor de t mayor de %.3f\n',t);
err(2)=2;
end

% Tiempo de residencia del liquido
tR=(AD*hB/1000.*den_L)/Lm;

if tR<3
% fprintf('Tiempo de residencia del liquido inferior a 3 s\n');
err(3)=3;
end

%% Dimensiones del plato
DPS.DC=DC;DPS.LW=LW; % diámetro del plato, m
DPS.hW=hW; % altura del derramadero, m
DPS.p=p; % distancia entre centros de perforaciones,mm
DPS.lp=lp; % espesor del plato, mm
DPS.AA=AA; % area activa, m2
DPS.AO=AO; % area orificios, m2
DPS.AAAC=AA/AC; % relación área activa/área de columna corregida
DPS.PMAX=max(P); % presión máxima, Pa
DPS.ht=max(ht)/1000; % caída de presión total, m
DPS.VP=V; DPS.LP=L; % flujos de vapor y líquido, kmol/s
%DPS.n=DPE.n; % número del plato
End
```