



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Química

**Biocombustibles a partir de residuos
agroalimentarios: aumento de la sostenibilidad
del proceso mediante el desarrollo de estrategias
de separación**

Autor:

Cristóbal Manchado, Gonzalo

Tutor 1: García Cubero, María Teresa

Tutor 2: Coca Sanz, Mónica

**Departamento de Ingeniería Química y
Tecnología del medio ambiente**

Valladolid, Julio, 2017.

CONTENIDO

1. RESUMEN/ABSTRACT	9
2. INTRODUCCIÓN	13
2.1. BUTANOL COMO BIOCOMBUSTIBLE	13
2.2. OFERTA Y DEMANDA DE LOS PRODUCTOS ABE A PARTIR DE AZÚCARES FERMENTABLES	14
2.3. PRINCIPALES PRODUCTORES DE BIOBUTANOL.....	15
2.4. PROYECCIONES DE FUTURO-MARCO LEGAL	16
2.5. FERMENTACIÓN ABE	17
2.5.1. <i>Evolución histórica</i>	17
2.5.2. <i>Biobutanol a partir de material ligno celulósico</i>	19
2.5.3. <i>Proceso de obtención de butanol a partir de bagazo de cerveza</i>	25
3. OBJETIVOS	29
4. ALTERNATIVAS DE SEPARACIÓN Y SELECCIÓN	33
4.1. TÉCNICAS DE SEPARACIÓN INTEGRADAS CON LA FERMENTACIÓN (IN-SITU)	35
4.1.1. <i>Gas de arrastre (Gas stripping)</i>	35
4.1.2. <i>Adsorción</i>	36
4.1.3. <i>Extracción líquido-líquido</i>	37
4.1.4. <i>Perstracción</i>	38
4.1.5. <i>Pervaporación</i>	39
4.1.6. <i>Comparación energética de técnicas de separación integradas con fermentación.</i>	40
4.2. TÉCNICAS DE SEPARACIÓN NO INTEGRADAS CON LA FERMENTACIÓN	41
4.2.1. <i>Destilación híbrida</i>	41
4.2.2. <i>Gas de arrastre</i>	43
4.2.3. <i>Resumen</i>	44
5. SIMULACIÓN DE ALTERNATIVAS CON ASPEN-PLUS®	47
5.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS. USO DE ASPEN-PLUS®	47
5.2. BASES DE DISEÑO	49
5.2.1. <i>Corriente de alimentación</i>	49
5.2.2. <i>Corrientes de productos y subproductos</i>	49
5.2.3. <i>Propiedades termodinámicas</i>	50
5.3. DESCRIPCIÓN DE LAS ALTERNATIVAS	52
5.3.1. <i>Alternativa 1: Destilación convencional</i>	52
5.3.2. <i>Alternativa 2: Gas de arrastre (Gas stripping)</i>	56
5.3.3. <i>Alternativa 3: Destilación híbrida</i>	58
5.3.4. <i>Alternativa 4: Separación de butanol sin recuperación de acetona</i>	69
6. RESULTADOS	75
6.1. BALANCES DE MATERIA-CORRIENTES DE PRODUCTOS Y SUBPRODUCTOS	75
6.2. EQUIPOS: DIMENSIONES Y CONDICIONES DE OPERACIÓN.....	77
6.3. REQUERIMIENTO ENERGÉTICO DE LAS ALTERNATIVAS DE SEPARACIÓN.....	83
6.3.1. <i>Resumen de necesidades energéticas de las alternativas simuladas</i>	86

6.4.	BALANCE ECONÓMICO	88
6.4.1.	<i>Alternativa 1: Destilación convencional</i>	<i>89</i>
6.4.2.	<i>Alternativa 2: Gas de arrastre</i>	<i>91</i>
6.4.3.	<i>Alternativa 3.1: Destilación híbrida. Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 2 torres de destilación.....</i>	<i>93</i>
6.4.4.	<i>Alternativa 3.2: Destilación híbrida. Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 1 torre de destilación.</i>	<i>96</i>
6.4.5.	<i>Alternativa 3.3: Destilación híbrida. Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia directa.</i>	<i>98</i>
6.4.6.	<i>Alternativa 3.4: Destilación híbrida. Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia indirecta.</i>	<i>101</i>
6.4.7.	<i>Alternativa 4: Separación de butanol sin recuperación de acetona</i>	<i>103</i>
6.4.8.	<i>Comparación del balance económico de las diferentes alternativas</i>	<i>105</i>
6.5.	ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE A CONCENTRACIÓN DE BUTANOL EN EL BALANCE ECONÓMICO DEL PROCESO	108
6.6.	EFLUENTES	112
7.	INTEGRACIÓN ENERGÉTICA	117
7.1.	CONCENTRACIÓN DE 8 G/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN	117
7.2.	CONCENTRACIÓN DE 12 G/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN	119
7.3.	CONCENTRACIÓN DE 16 G/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN	120
7.4.	CONCENTRACIÓN DE 18 G/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN	122
8.	CONCLUSIONES.....	129
9.	BIBLIOGRAFÍA	133

ÍNDICE DE FIGURAS

- Figura 1. Evolución del mercado de la fermentación ABE en el siglo XX. [11]
- Figura 2. Metabolismo simplificado de Clostridium sp. [16].
- Figura 3. Ruta metabólica completa de una fermentación ABE. [17].
- Figura 4. Variación en la concentración de las especies en función del tiempo de fermentación. [14].
- Figura 5. Esquema del proceso de fermentación ABE a partir de bagazo de cerveza.
- Figura 6. Tren de separación ABE- Torres de destilación en serie.
- Figura 7. Equilibrio líquido vapor representando la fracción másica de butanol. Sistema butanol-agua a 1 atm. [17].
- Figura 8. Esquema de separación por gas de arrastre
- Figura 9. Esquema de separación por adsorción
- Figura 10. Esquema de extracción líquido-líquido
- Figura 11. Esquema de separación por Perstracción
- Figura 12. Esquema de separación por Pervaporación
- Figura 13. Diagrama de flujo de destilación híbrida
- Figura 14. Diagrama de flujo de la técnica de gas de arrastre
- Figura 15. Elección de paquete de propiedades para simulaciones en ASPEN-PLUS® (1).
- Figura 16. Elección de paquete de propiedades para simulación en ASPEN-PLUS® (2).
- Figura 17. Diagrama de residuos acetona, butanol, agua. Secuencia de destilación.
- Figura 18. Diagrama de flujo de l destilación convencional. ASPEN-PLUS®.
- Figura 19. Diagrama de flujo del gas de arrastre. ASPEN-PLUS®
- Figura 20. Diagrama de flujo de la destilación híbrida. Parte común a las 4 alternativas. ASPEN-PLUS®
- Figura 21. Diagrama de residuos acetona, butanol, agua. Separación de opción 1
- Figura 22. Diagrama de flujo de la opción 1 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®
- Figura 23. Diagrama de flujo de la opción 2 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®
- Figura 24. Diagrama de residuos agua, mesitileno, butanol. Secuencia directa de separación.
- Figura 25. Diagrama de flujo de la opción 4 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®
- Figura 26. . Diagrama de residuos agua, mesitileno, butanol. Secuencia indirecta de separación.
- Figura 27. Diagrama de flujo de la opción 4 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®
- Figura 28. Diagrama de residuos butanol, acetona, agua. Secuencia de separación.
- Figura 29. Diagrama de flujo de la alternativa no bibliográfica.
- Figura 30. Corrientes sobre el pinch. 8 g/L en la alimentación
- Figura 31. Integración energética. 8 g/L en la alimentación
- Figura 32. Corrientes sobre el pinch. 12 g/L en la alimentación
- Figura 33. Integración energética. 12 g/L en la alimentación
- Figura 34. Corrientes sobre el pinch. 16 g/L en la alimentación
- Figura 35. Integración energética. 16 g/L en la alimentación
- Figura 36. Corrientes sobre el pinch. 18 g/L en la alimentación
- Figura 37. Integración energética. 18 g/L en la alimentación

ÍNDICE DE TABLAS

- Tabla 1. Principales productores de Acetona, Butanol y Etanol. [5].
- Tabla 2. Preferencia de los azúcares en reactores discontinuos para diferentes cultivos Clostridium. [15]
- Tabla 3. Consumo energético de cada alternativa de separación in-situ. [20].
- Tabla 4. Comparación de propiedades para dos solventes distintos [21]
- Tabla 5. Comparación de la demanda energética para distintos disolventes. [21]
- Tabla 6. Corriente de alimentación.
- Tabla 7. Corrientes de productos y subproducto
- Tabla 8. Equipos. Destilación convencional
- Tabla 9. Equipos. Gas de arrastre
- Tabla 10. Equipos. Extracción total de mesitileno-Posterior separación con dos torres.
- Tabla 11. Equipos. Extracción total de mesitileno-Posterior separación con una torre.
- Tabla 12. Equipos. Extracción parcial de mesitileno-Posterior separación mediante secuencia directa.
- Tabla 13. Equipos. Extracción parcial de mesitileno-Posterior separación mediante secuencia indirecta.
- Tabla 14. Equipos. Separación de Butanol sin recuperación de acetona.
- Tabla 15. Necesidades energéticas. Destilación convencional
- Tabla 16. Necesidades energéticas. Gas de arrastre
- Tabla 17. Necesidades energéticas. Extracción total de mesitileno- Posterior separación mediante dos torres
- Tabla 18. Necesidades energéticas. Extracción total de mesitileno- Posterior separación mediante una torre
- Tabla 19. Necesidades energéticas. Extracción parcial de mesitileno- Posterior separación mediante secuencia directa
- Tabla 20. Necesidades energéticas. Extracción parcial de mesitileno- Posterior separación mediante secuencia indirecta
- Tabla 21. Necesidades energéticas. Separación de Butanol sin recuperación de acetona.
- Tabla 22. Comparación de las necesidades energéticas totales entre las alternativas.
- Tabla 23. Costes de equipo. Destilación convencional.
- Tabla 24. Costes de operación. Destilación convencional
- Tabla 25. Costes de implementación. Destilación convencional
- Tabla 26. Costes de servicios generales. Destilación convencional
- Tabla 27. Costes de equipo. Gas de arrastre
- Tabla 28. Costes de operación. Gas de arrastre.
- Tabla 29. Costes de implementación. Gas de arrastre.
- Tabla 30. Costes de servicios generales. Gas de arrastre
- Tabla 31. Costes de equipo. Destilación híbrida (I)
- Tabla 32. Costes de operación. Destilación híbrida (I)
- Tabla 33. Costes de implementación. Destilación híbrida (I)
- Tabla 34. Costes de servicios generales. Destilación híbrida(I)
- Tabla 35. Costes de equipo. Destilación híbrida (II)

Tabla 36. Costes de operación. Destilación híbrida (II)

Tabla 37. Costes de implementación. Destilación híbrida (II)

Tabla 38. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (II)

Tabla 39. Costes de equipo. Destilación híbrida (III)

Tabla 40. Costes de operación. Destilación híbrida (III)

Tabla 41. Costes de implementación. Destilación híbrida (III)

Tabla 42. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (III)

Tabla 43. Costes de equipo. Destilación híbrida (IV)

Tabla 44. Costes de operación. Destilación híbrida (IV)

Tabla 45. Costes de implementación. Destilación híbrida (IV)

Tabla 46. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (IV)

Tabla 47. Costes de equipo. Separación de butanol sin acetona

Tabla 48. Costes de equipo. Separación de butanol sin acetona

Tabla 49. Costes de implementación. Separación de butanol sin acetona

Tabla 50. Costes de servicios generales. Separación de butanol sin acetona

Tabla 51. Resumen de costes y beneficios de cada alternativa. Precio de productos para rentabilidad del proceso

Tabla 52. Resumen de costes y precios bajo distintas concentraciones en la alimentación

Tabla 53. DQO y biogás generado en cada simulación

Tabla 54. Corrientes de integración energética. 8 g/L en la alimentación

Tabla 55. Corrientes de integración energética.12 g/L en la alimentación

Tabla 56. Corrientes de integración energética.16 g/L en la alimentación

Tabla 57. Corrientes de integración energética.18 g/L en la alimentación

Tabla 58. Resumen de necesidades energéticas de los servicios generales.

Tabla 59. Resumen de costes y precios tras integración energética.

ÍNDICE DE GRÁFICAS

- Gráfica 1. Resumen de la energía total para cada alternativa
- Gráfica 2. Resumen de la energía total por unidad de butanol recuperado
- Gráfica 3. Comparativa de costes de equipo. Destilación convencional
- Gráfica 4. Comparativa de costes de equipo. Gas de arrastre
- Gráfica 5. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (I)
- Gráfica 6. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (II)
- Gráfica 7. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (III)
- Gráfica 8. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (IV)
- Gráfica 9. Comparativa de costes de equipo. Separación de butanol sin acetona
- Gráfica 10. Comparativa de costes de implementación (USD)
- Gráfica 11. Comparativa de costes de equipos (USD)
- Gráfica 12. Comparativa de costes de servicios generales (USD/Y)
- Gráfica 13. Comparativa de costes de operación (USD/Y)
- Gráfica 14. Comparativa de precio de butanol (USD/kg)
- Gráfica 15. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-destilación convencional
- Gráfica 16. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-gas de arrastre
- Gráfica 17. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-híbrida 1 torre
- Gráfica 18. Precio del butanol y (USD/kg)

1. RESUMEN/ABSTRACT

1. RESUMEN/ABSTRACT

El proceso de obtención de biobutanol de segunda generación, a partir de biomasa lignocelulósica, se basa en la fermentación ABE, llevada a cabo por bacterias tipo *Clostridium beijerinckii*.

El presente TFG ha evaluado mediante el software ASPEN-PLUS® diferentes alternativas de separación de productos de fermentación ABE con el objetivo de identificar la opción más rentable económicamente.

La alternativa energéticamente más favorable es la de gas de arrastre, con un consumo energético de 21142,7 kJ/kg de butanol, siendo posible reducir este valor mediante una integración energética. Sin embargo, desde el punto de vista económico la alternativa más rentable es la destilación convencional ya que el mayor número de equipos requeridos en la alternativa de gas de arrastre, aumenta considerablemente los costes totales del proceso.

Aumentar la concentración de butanol en el caldo de fermentación, consigue rentabilizar el proceso. Considerando una concentración inicial de 18 g/L de butanol, el precio de venta correspondiente a la destilación convencional sería 1,65 \$/kg para el butanol.

Palabras clave: butanol, acetona, separación, energía, rentabilidad.

The process where second generation butanol is obtained, from lignocellulosic biomass, is based on ABE fermentation. It is carried out by *Clostridium beijerinckii* bacteria.

Through the following FDP (Final Degree Project), so as to separate ABE fermentation products, different alternatives have been evaluated using the software ASPEN-PLUS®, with the aim of identifying the most the most economical alternative.

From the point of view of energy, the best alternative is gas stripping, with an energy consumption of 21142.7 kJ / kg butanol. It is possible to reduce this value making an energy integration. However, the most economical alternative is conventional distillation, because of the large number of equipment required in gas stripping alternative, that supposes an increase in the total process costs.

To increase the concentration of butanol in the fermentation broth, makes the process more profitable. Considering an initial concentration of 18 g / L of butanol, the sale price for conventional distillation would be 1.65 \$/ kg for butanol.

Key words: butanol, acetone, separation, energy, profitability.

2. INTRODUCCIÓN

2. INTRODUCCIÓN

2.1. BUTANOL COMO BIOCOMBUSTIBLE

Los combustibles fósiles (carbón, petróleo y gas natural) han sido utilizados desde la Antigüedad como fuentes de energía, así como materias primas fundamentales en la industria, en la producción de numerosos productos derivados de ellos.

A nivel mundial, el crecimiento de la población y la industrialización han provocado un aumento considerable en el consumo de energía.

El alto consumo de petróleo es uno de los causantes del notable calentamiento global que ha experimentado el planeta en las últimas décadas. Según el IPCC (Panel Intergubernamental del Cambio Climático) la temperatura media del planeta se incrementará entre 1.4°C y 5.8°C para el año 2100. [1].

Es por ello que desde las diferentes potencias mundiales surge una preocupación ecológica que desemboca en el replanteamiento urgente de estructuras alternativas, para sustituir o, por lo menos, disminuir, el uso de estos combustibles fósiles y sus derivados.

Como consecuencia directa, aparecen los biocombustibles. Son carburantes obtenidos a partir de materia orgánica mediante un proceso biológico. Se clasifican generalmente atendiendo al tipo de materia prima utilizado. Si provienen de biomasa que puede ser usado para alimentación humana o ganado, biocombustibles de primera generación o 1G. Si el origen reside en la biomasa procedente de residuos se llaman biocombustibles de segunda generación o 2G. También existe un tercer tipo, biocombustibles de tercera generación o 3G, donde la biomasa ha sido específicamente cultivada para tal fin, es el caso de las algas marinas [2].

Dentro de los biocombustibles se puede hacer otra división: líquidos o en estado gas. Dentro de los primeros, los más importantes son los bioalcoholes (biometanol, bioetanol y biobutanol), y el biodiesel. En estado gaseoso el más relevante es el biogás.

El butanol es un compuesto químico con una demanda mundial de 5Mt al año, con un precio de venta entre 0.9\$/kg y 1\$/kg y es considerado como una alternativa potencial al combustible tradicional. [3].

Ofrece numerosas ventajas sobre los demás biocombustibles:

- El poder calorífico del butanol (29MJ/L) es más próximo al de la gasolina (32 MJ/L), mientras que el del etanol (16 MJ/L) es significativamente menor. [25]. Esto implica que el etanol produce un 75% de la energía que produce el mismo volumen de gasolina, mientras que el butanol produce un 95%.

- Es potencialmente menos corrosivo que el etanol.
- Tiene una baja presión de vapor, lo que implica que puede ser añadido a la gasolina en porciones mayores que el etanol. Mientras que el etanol se incorpora entre un 5% y un 10% en gasolina, en butanol se puede llegar hasta el 20% sin necesidad de modificar el motor.
- Posee una menor miscibilidad con el agua. Esto provoca que el combustible no formará dos fases, lo que se traduce en la reducción de calidad, lo que sí ocurre en el caso del etanol. Además, los tanques de almacenamiento y bombas no tendrán que sufrir especiales modificaciones para su uso.
- Su punto de inflamación es más alto, lo que en términos de seguridad es más aconsejable.
- Puede llegar a reducir las emisiones de hidrocarburos en un 95%, de los óxidos de nitrógeno un 37%, y gases de efecto invernadero (GEI) entre un 10% y 30%.

Debido a lo mencionado anteriormente, incluyendo la seguridad y su simplicidad de uso el butanol supera a etanol, biodiesel e hidrógeno como sustituto de la gasolina. [4].

2.2. OFERTA Y DEMANDA DE LOS PRODUCTOS ABE A PARTIR DE AZÚCARES FERMENTABLES

Los productos ABE, acetona, butanol, agua, son aquellos que son obtenidos a partir de una fermentación bacteriana.

La tecnología y los productos ABE se utilizan en una gran variedad de mercados, incluyendo recubrimientos, adhesivos, tintas, polímeros, plásticos y como aditivo en gasolinas.

Como mezcla de combustibles, el biobutanol representa una oportunidad de mercado de aproximadamente 80 mil millones de dólares equivalentes a 159 teralitros por año. [5]. En 2010, el mercado mundial de biobutanol fue de 2.8 millones de toneladas, con un valor estimado aproximadamente de 5 mil millones de dólares. Se espera que el crecimiento medio sea en 3.2% anual, donde la demanda se concentra en América del Norte (28%), Europa Occidental (23%) y el Norte de Asia Oriental (35%). [6].

Por otra parte, la acetona es uno de los disolventes generales que más empleo tienen en la técnica industrial y profesional, debido a sus excelentes propiedades disolventes. Es un eficaz quitamanchas y es muy utilizado para quitar el esmalte de las uñas. La aplicación más importante de la acetona se encuentra en la fabricación de Metil metacrilato (MMA), mercado que experimenta una demanda creciente (3% anual) desde el 2002 por el incremento en los usos del Polimetilmetacrilato (PMMA), un material de antifracturación alternativo al vidrio en la industria de la construcción.

Por último, el uso del etanol en los últimos años como combustible alternativo al proveniente del petróleo ha ido en constante aumento a nivel global, debido a la necesidad de reducir la dependencia de combustibles derivados del petróleo ante sus altos y crecientes precios y a su vez, cumplir con el Protocolo de Kyoto.

Durante el periodo 2004 - 2009, la producción mundial de etanol registró un crecimiento promedio anual de 17.3%. Según estimaciones de "The Global Renewable Fuels Alliance" (GRFA), la producción mundial en el 2010 habría alcanzado un crecimiento de 16.2% respecto al 2009, explicado principalmente por la recuperación de la demanda de combustibles, en EE.UU. y en los países de la Unión Europea. [7]

En España, la capacidad de producción instalada a finales de 2010 era de 464.000 toneladas de bioetanol, repartida en 4 plantas, y 4.318.400 toneladas de biodiesel, repartida en 47 plantas. [8]

2.3. PRINCIPALES PRODUCTORES DE BIOBUTANOL

Actualmente a nivel mundial, el 67% de las empresas productoras de energías renovables se dedica a la producción de biocombustibles. Estados Unidos encabeza la lista de los países con mayor producción de estos compuestos. En segundo lugar, se encuentra China, con aproximadamente el 3 % de las empresas mundiales, justo por delante de Alemania, Francia y Brasil. [6].

En la Tabla 1 se muestran algunos de los principales productores de acetona, butanol y etanol en el mundo que utilizan biomasa como materia prima.

INDUSTRIA	LUGAR DE ORIGEN	MATERIA PRIMA
Butamax advanced Biofuels LL.	Estados Unidos	Maíz y caña de azúcar
Gevo	Estados Unidos	Maíz, caña de azúcar y remolacha
Cobalt technologies	Estados Unidos	Biomasa de pulpa de madera y remolacha azucarera
Sorvert	Reino Unido	Fermentación de residuos en descomposición y residuos de uso doméstico
Butyl fuel LL C	Reino Unido	Pulpa de madera y otros productos derivados de la madera
Green-biologics	Estados Unidos	Maíz y caña de azúcar
Cathay Industrial Biotech	China	Maíz y caña de azúcar

Tabla 1. Principales productores de Acetona, Butanol y Etanol. [5].

2.4. PROYECCIONES DE FUTURO-MARCO LEGAL

A raíz de la preocupación por el agotamiento de los combustibles fósiles, así como por la contaminación que implica, tanto a nivel nacional como a nivel europeo, se elabora un marco legal en el que se fijan una serie de objetivos con los que reducir los efectos del cambio climático. [9]

El Libro Blanco de la Comisión Europea establece que el 12% del consumo bruto de energía procede en el año 2010 de fuentes renovables, medida que en cierto modo complementa el compromiso del Protocolo de Kyoto adquirido para el periodo 2008 – 2012 por la Unión Europea, que consiste en reducir las emisiones a la atmósfera de gases de efecto invernadero un 8% con respecto a los niveles de emisión de 1990.

La Directiva 2009/28/CE es parte del denominado Paquete Europeo de Energía y Cambio Climático, que establece las bases para que la UE logre sus objetivos para 2020: Un 20% de mejora de la eficiencia energética, una contribución de las energías renovables del 20% y una reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) del 20%, que podría aumentar hasta el 30%.

A nivel nacional, una vez finalizado el periodo de vigencia del Plan de Energías Renovables (PER) 2005 – 2010, se elabora el nuevo PER para el periodo 2011 – 2020, en el que no sólo se incluyen nuevos escenarios energéticos, sino que también incorpora los nuevos objetivos acordados con la Directiva 2008/28/CE del Parlamento Europeo, relativa al fomento del uso de energía procedente de fuentes renovables. Estos objetivos son: [8]

- Conseguir una cuota mínima del 20% de energía procedente de fuentes renovables en el consumo final bruto de energía de la Unión Europea.
- Conseguir una cuota mínima del 20% de energía procedente de fuentes renovables en el consumo final bruto de energía de España.
- Conseguir una cuota mínima del 10% de energía procedente de fuentes renovables en el consumo de energía en el sector del transporte en cada Estado miembro para el año 2020.

Las fuentes de energía renovables a las que se refiere el Plan de Energías Renovables 2011 – 2020 son las siguientes: biocombustibles, biogás, biomasa, energías del mar, eólica, geotermia y otras energías del ambiente, hidroeléctrica, residuos (municipales, industriales y lodos de EDAR) y solar (fotovoltaica, térmica y termoeléctrica). [8]

En cuanto a la utilización de energías renovables en el transporte y al consumo de biocarburantes en este sector, el favorable tratamiento fiscal y la obligación de su utilización han llevado a un crecimiento del consumo de biocombustibles sobre el consumo de gasolina y gasóleo desde el 0,39% en 2004 al 4,99% en 2010 (aplicando la metodología definida en el PER 2005 – 2010).

2.5. FERMENTACIÓN ABE

2.5.1. Evolución histórica

La fermentación ABE es uno de los bioprocesos conocidos y aplicados a nivel industrial más antiguos y de mayor relevancia tras la fermentación alcohólica. Cuenta con una historia de más de 100 años.

La primera vez que se llevó a cabo la producción de butanol por medio de métodos biológicos fue en 1861, de la mano del químico y microbiólogo Louis Pasteur.

Casi medio siglo después, en 1905, el bioquímico austriaco Franz Schardinger descubrió que se podía producir acetona mediante un proceso similar.

Durante la primera mitad del siglo XX, la fermentación acetobutílica fue ampliamente investigada. El hecho clave con el que se comenzó la explotación industrial de este proceso tuvo lugar en 1916, cuando Chaim Weizmann logró aislar cepas de la bacteria *Clostridium acetobutylicum*, que tenían rendimientos de producción de butanol más elevados respecto a las utilizadas anteriormente.

En la década de los años 40, dos tercios del butanol y una décima parte de la acetona producida en Estados Unidos procedía de la fermentación ABE, utilizando principalmente maíz, trigo y centeno como materias primas. [10]

A partir de 1950, la industria petroquímica experimenta un florecimiento con el que se consigue obtener mayores cantidades de butanol y acetona de una forma más barata, lo que supone el cierre de las plantas industriales de fermentación ABE de Europa y Norteamérica, aunque se mantiene en países como Sudáfrica, Rusia y China debido al bajo coste de la melaza como sustrato.

La crisis del petróleo en 1973 impulsó de nuevo la búsqueda de procesos relacionados con el metabolismo y genética de bacterias, por lo que en los últimos años ha resurgido el interés en la búsqueda de alternativas no basadas en el petróleo para la obtención de diversos productos, entre ellos el butanol.

Finalmente, a partir de 2008 se observa el comienzo de una tercera etapa que predice un resurgimiento de la fermentación ABE a lo largo del siglo XXI.

La siguiente figura representa la evolución del mercado de la fermentación ABE durante el siglo XX, en la que se observa con claridad el desarrollo de la fermentación ABE durante la primera mitad de siglo, su posterior caída y, por tanto, el auge de la industria petroquímica en la segunda mitad de siglo y, por último, un resurgimiento de la fermentación ABE a principios del siglo XXI.

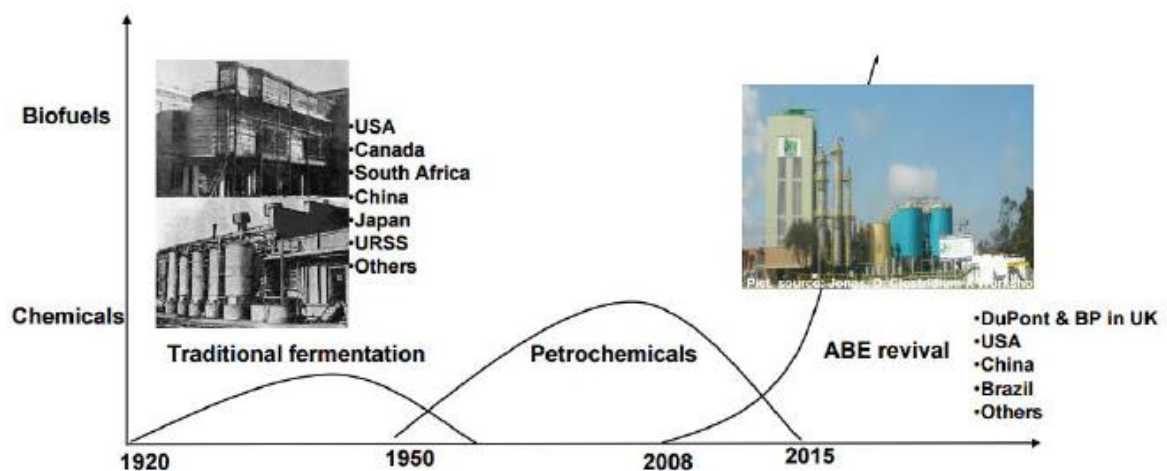


Figura 1. Evolución del mercado de la fermentación ABE en el siglo XX. [11]

Actualmente, se puede destacar un nuevo proyecto innovador en este campo, Butamax® Advanced Biofuels, una empresa conjunta de BP y DuPont, ha desarrollado una innovadora tecnología de producción de bio-isobutanol que ofrece un biocombustible de bajo costo y alto valor para el suministro global de combustibles para el transporte. La tecnología Butamax está diseñada para convertir los azúcares de varias materias primas de biomasa, incluyendo maíz y caña de azúcar, en bio-isobutanol. Para ello utiliza las instalaciones existentes de producción de biocombustibles, más en concreto las de bioetanol. [12]

2.5.2. Biobutanol a partir de material lignocelulósico

La materia prima utilizada para la obtención de biobutanol varía en función de si es considerado de primera, segunda o tercera generación. [2].

Las principales fuentes de primera generación son los materiales azucarados y amiláceos. Los cultivos empleados son la caña de azúcar o la remolacha en caso de materiales azucarados. Si son sustancias amiláceas el cultivo es el grano de maíz o de cereal. Tienen las ventajas de que son cultivos prácticamente disponibles por todo el mundo, y la tecnología para su transformación es muy eficiente y sencilla. Sin embargo, se debería destinar casi la totalidad de la superficie cultivable para poder sustituir el uso de combustibles fósiles, por lo que no habría cosechas destinadas a la alimentación. Surge pues un conflicto ético moral: cosechas para comida o para combustibles.

Es por ello que surgen las materias primas de segunda generación, son sustancias lignocelulósicas procedentes de residuos agrícolas, forestales, o de distintos procesos industriales. Los más utilizados son el bagazo de caña, la paja de maíz y de trigo, y residuos derivados de la industria del papel, ya que tienen un alto contenido en celulosa. Tienen la gran ventaja de que no surge el conflicto ético sobre la utilización de las cosechas, además de dotar de un poder económico a los residuos que antes carecían de valor. Sin embargo, requieren una tecnología más compleja para su obtención, lo que en muchos casos aumenta el coste de producción. [2]

La primera etapa del proceso de obtención de butanol a partir de materia prima lignocelulósica consiste en realizar unas operaciones de pretratamiento e hidrólisis enzimática para alterar la estructura de la materia prima, y descomponer las cadenas de polisacáridos, en monómeros, que son usados como sustrato por los microorganismos. En función de la materia prima que se utilice, el pretratamiento varía, así pues, se están realizando múltiples investigaciones para optimizar esta fase del proceso, de cara a aumentar el rendimiento de obtención de butanol.

Posteriormente se lleva a cabo la fermentación. Dependiendo de la procedencia del material lignocelulósico, es posible que no contenga los nutrientes necesarios para la fermentación (nitrógeno, fósforo y sales) y por ello, puede ser necesario un aporte externo de dichos nutrientes.

En cuanto al microorganismo utilizado, la producción de butanol por fermentación puede ser llevada a cabo por diferentes tipos de cepas Clostridium productoras de solventes (C. acetobutylicum, C. saccharobutylicum, C. butylicum, C. beijerinckii) [13].

Estas bacterias presentan forma alargada durante la fase de crecimiento exponencial y forma ovalada cuando se encuentra en condiciones adversas.

Las cepas de Clostridium que producen butanol son capaces de consumir sacarosa, fructosa, glucosa, manosa, lactosa, dextrina, almidón, glicerol, pentosas (xilosa, arabinosa) e inulina [14].

En la Tabla 2 se muestra la preferencia de diferentes cepas en el consumo de azúcares simples (hexosas y pentosas) [15].

Organismo	Productividad [gL ⁻¹ h ⁻¹]	ABE [g/L]	% utilizado de Glucosa: manosa : arabinosa: xilosa:	Preferencias de los azúcares
C. acetobutylicum 260	0.34	20,3	100: 100: 92: 71	Glucosa> manosa> arabinosa> xilosa
C. acetobutylicum 824	0.19	18,4	100: 100: 60: 80	Glucosa> manosa> xilosa>arabinosa
C. saccharobutylicum 262	0.20	14,3	74: 38: 63: 42	Glucosa> arabinosa> xilosa>manosa
C.butylicum NRRL 592	0.33	19,7	100: 100: 89: 86	Glucosa >manosa> arabinosa>xilosa
C. beijerinckii 8052	0.24	14,6	81: 42: 49: 64	Glucosa > xilosa> arabinosa>manosa
C.beijerinckii BA101	0.25	18,0	100: 59: 65: 78	Glucosa > xilosa> arabinosa>manosa

Tabla 2. Preferencia de los azúcares en reactores discontinuos para diferentes cultivos Clostridium. [15]

La fermentación consiste en dos etapas:

– Acidogénesis: Los microorganismos metabolizan los azúcares y se genera masa celular, aunque esta generación es baja dado que la cinética exponencial de crecimiento sólo tiene lugar durante las 3 o 4 primeras horas. Como consecuencia del metabolismo, se produce una excreción de ácido acético y ácido butírico, que hace descender el pH del medio (hasta 4 aproximadamente). También se produce un desprendimiento de hidrógeno y dióxido de carbono de igual composición en volumen. Esta etapa tiene un tiempo de duración de entre 12 y 18 horas.

- Solventogénesis: durante esta etapa, el metabolismo de los azúcares sufre una reorientación y los ácidos producidos anteriormente son reasimilados, con una consecuente subida del pH. Se produce un bajo crecimiento celular y una pequeña generación de gases, que en este caso es mucho mayor para el dióxido de carbono que para el hidrógeno. En esta fase es en la que tiene lugar la formación de acetona, butanol y etanol, por lo que es necesario controlar una serie de factores determinantes para que este proceso se desarrolle correctamente:

- pH del medio de cultivo.
- Concentración de los productos ácidos.
- Nivel de nutrientes en el medio.
- Temperatura del medio.
- Concentración de oxígeno, proceso anaerobio.

En la figura 2, se observa la ruta metabólica para la obtención de biobutanol:

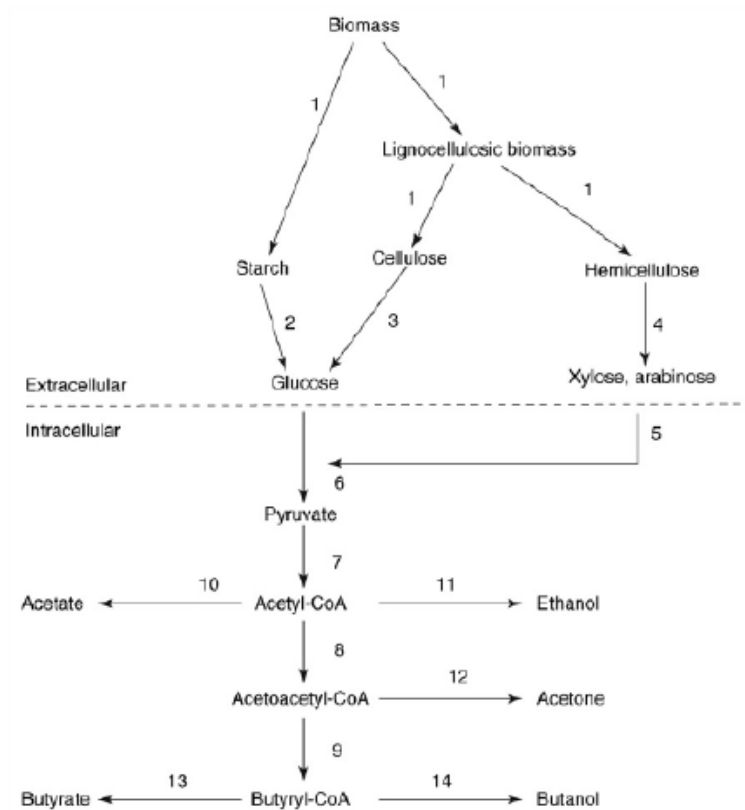


Figura 2. Metabolismo simplificado de *Clostridium sp.* [16].

En la figura 3, se representa la ruta metabólica más detallada:

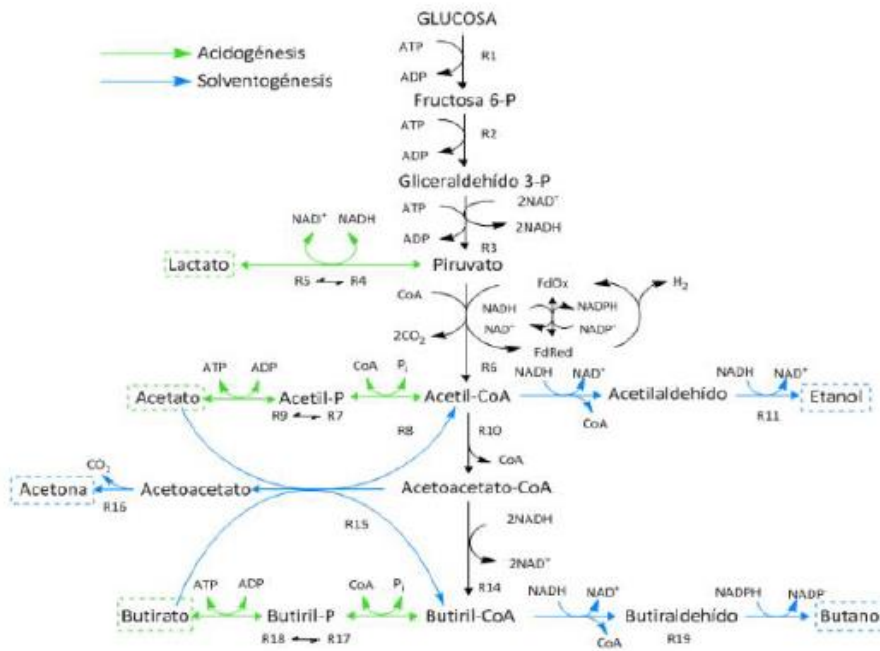


Figura 3. Ruta metabólica completa de una fermentación ABE. [17].

Respecto a los caldos de fermentación, su composición exacta varía mucho dependiendo del tipo de pretratamiento, sustrato y bacteria utilizado, así como el tiempo de fermentación y las condiciones de medio de cultivo. Para materias primas de segunda generación, los caldos son mucho más diluidos que los obtenidos a partir de sustratos de 1G, con lo que los costes en la etapa de separación y purificación serán mucho mayores.

Además, existen una serie de limitaciones en este proceso biológico, tal y como se expone a continuación:

- Para concentraciones de butanol superiores a 20g/L, aparece lo que se denomina inhibición por producto que supone una reducción en el progreso de la fermentación.
- La velocidad volumétrica de formación de butanol es bastante baja, 0.5 g/(L·h) aproximadamente.
- El rendimiento de formación de butanol es bastante bajo, entre 0.28g y 0.33g de butanol por cada gramo de sustrato utilizado.

Existen pues unas pautas comunes a todos los caldos de fermentación ABE:

- Los caldos de fermentación están formados en su gran mayoría de agua (por encima del 90%).
- La concentración de solventes ABE rara vez supera los 20 g/L. [18]
- La concentración de butanol suele encontrarse en torno a los 10 g/L, salvo en ciertas variantes de las especies utilizadas que sean más resistentes a la inhibición por producto en las que se puede obtener un valor mayor.

Como ya se ha mencionado anteriormente, el tiempo de fermentación es un factor muy importante. La figura 4 relaciona la dependencia de esta variable con la formación de los productos deseados.

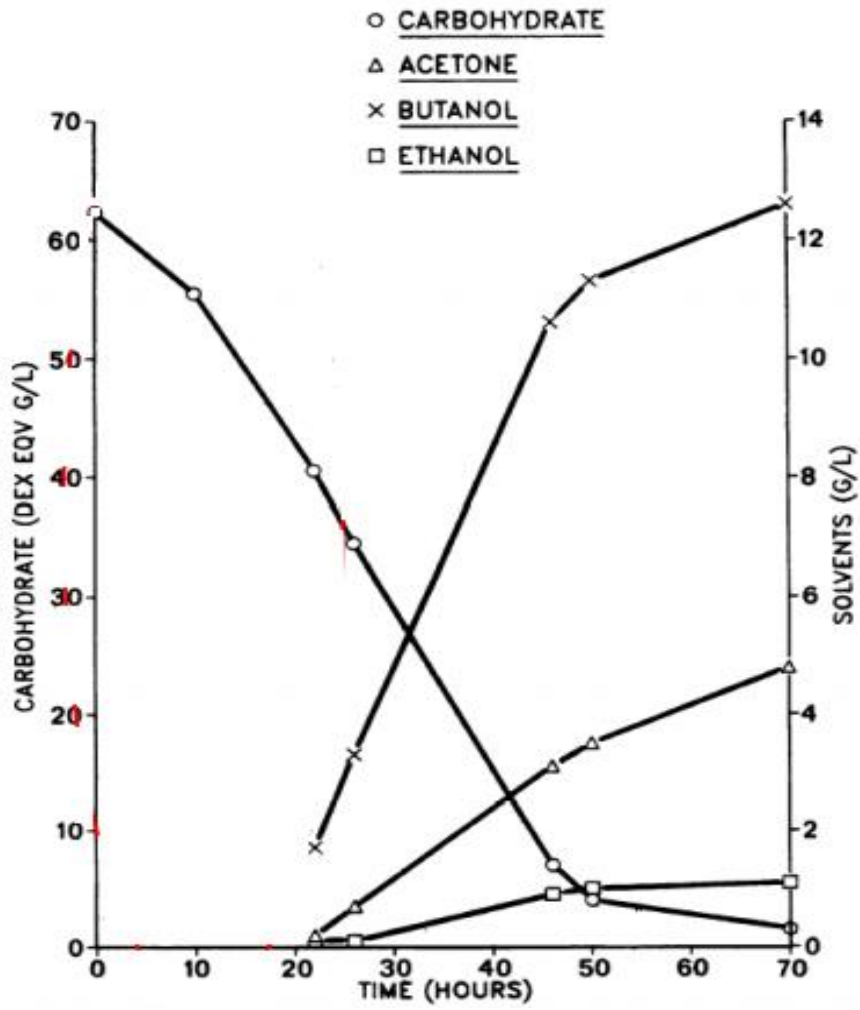


Figura 4. Variación en la concentración de las especies en función del tiempo de fermentación. [14].

2.5.3. Proceso de obtención de butanol a partir de bagazo de cerveza

El Trabajo fin de grado se ha realizado en el GIR (Grupos de Investigación Reconocidos) de Tecnología de Procesos Químicos y Bioquímicos, que actualmente está trabajando en la valorización eficiente del residuo sólido de la industria de cerveza para la producción de biobutanol y bioproductos: BUTBEER (RefCTQ2014-58777-R).

El bagazo de cerveza es un subproducto de la industria cervecera resultante del proceso de prensado y filtración del mosto obtenido tras la sacarificación del grano de cereal.

En la figura 5 se distinguen las etapas llevadas a cabo en el proceso de obtención de biobutanol:

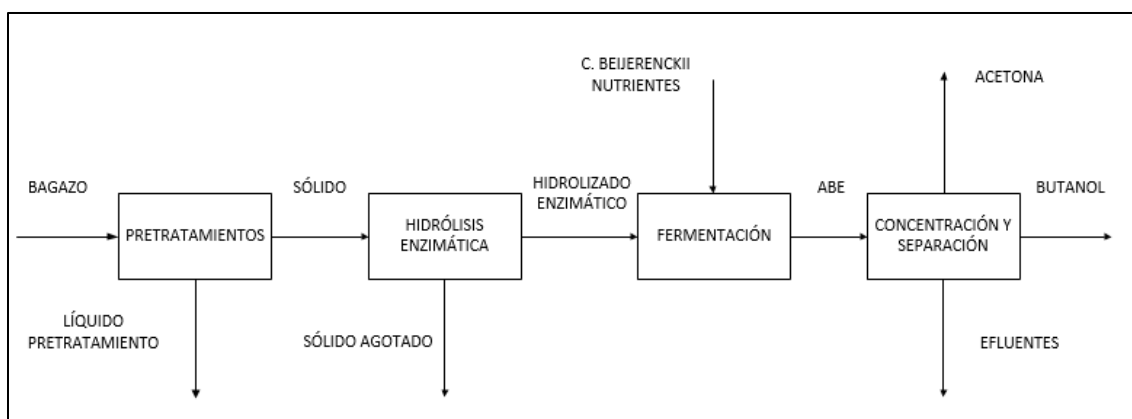


Figura 5. Esquema del proceso de fermentación ABE a partir de bagazo de cerveza.

El pretratamiento tiene la principal misión de hacer más degradable a la celulosa, de forma que, en la hidrólisis enzimática, aumente la proporción de monosacáridos en el hidrolizado. Se está analizando la eficacia de diferentes pretratamientos de tipo químico (ácido y alcalino), que van acompañados de la exposición del bagazo de cerveza a alta temperatura (121°C) durante 30 minutos.

Una vez pre-tratado el bagazo, se lleva a cabo la hidrólisis enzimática con el objetivo de romper las largas cadenas de los polisacáridos, celulosa y hemicelulosa, en azúcares más sencillos y fermentables, como son la glucosa, xilosa y arabinosa. Esta etapa se lleva a cabo en un reactor de alta carga durante unas 48 horas con enzimas de tipo celulasas y β -glucosidasas.

Previo a la fermentación, hay que preparar el inóculo, el microorganismo utilizado es el *Clostridium beijerenckii*.

Por último, se lleva a cabo la fermentación, donde al hidrolizado se le añade hierro, sales minerales y vitaminas, para el correcto desarrollo del bioproceso. Tiene lugar en un biorreactor en condiciones anaerobias, a 35°C durante 96.

El resultado es un caldo de fermentación muy diluido, donde el butanol es el compuesto mayoritario de los productos ABE, ya que la cepa utilizada no produce etanol, solo butanol y acetona.

3.OBJETIVOS

3. OBJETIVOS

El objetivo principal de este TFG, es la evaluación técnica, energética y económica de diferentes alternativas de separación de solventes ABE, no integradas en la fermentación.

Para ello se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Simular las diferentes alternativas para la separación de solventes ABE, mediante ASPEN-PLUS®, a partir de un caldo de fermentación diluido en butanol y acetona.
- Realizar un estudio técnico, energético y económico de cada una de las alternativas de separación.
- Reducir el consumo energético de las alternativas mediante un análisis de pinch e integración energética.
- Seleccionar la alternativa más rentable desde el punto de vista económico.
- Realizar un análisis de sensibilidad, analizando la influencia de la concentración de butanol y acetona en el caldo de fermentación, en los costes del proceso.

4. ALTERNATIVAS DE SEPARACIÓN Y SELECCIÓN

4. ALTERNATIVAS DE SEPARACIÓN Y SELECCIÓN

En el proceso de obtención de biobutanol mediante la fermentación ABE, una fase de suma importancia es la separación y purificación de los compuestos. El caldo de fermentación está sumamente diluido, lo que implica un incremento en los costes de operación en comparación con la producción de etanol, donde los caldos están más concentrados, en torno al 5% y 8%.

En este apartado se exponen nociones generales de los distintos sistemas de separación posibles para una fermentación ABE. Se están investigando métodos alternativos al proceso convencional, el cual consiste en torres de destilación en serie.

En la figura 6, se visualiza el diagrama de flujo del método de separación convencional mediante torres de destilación:

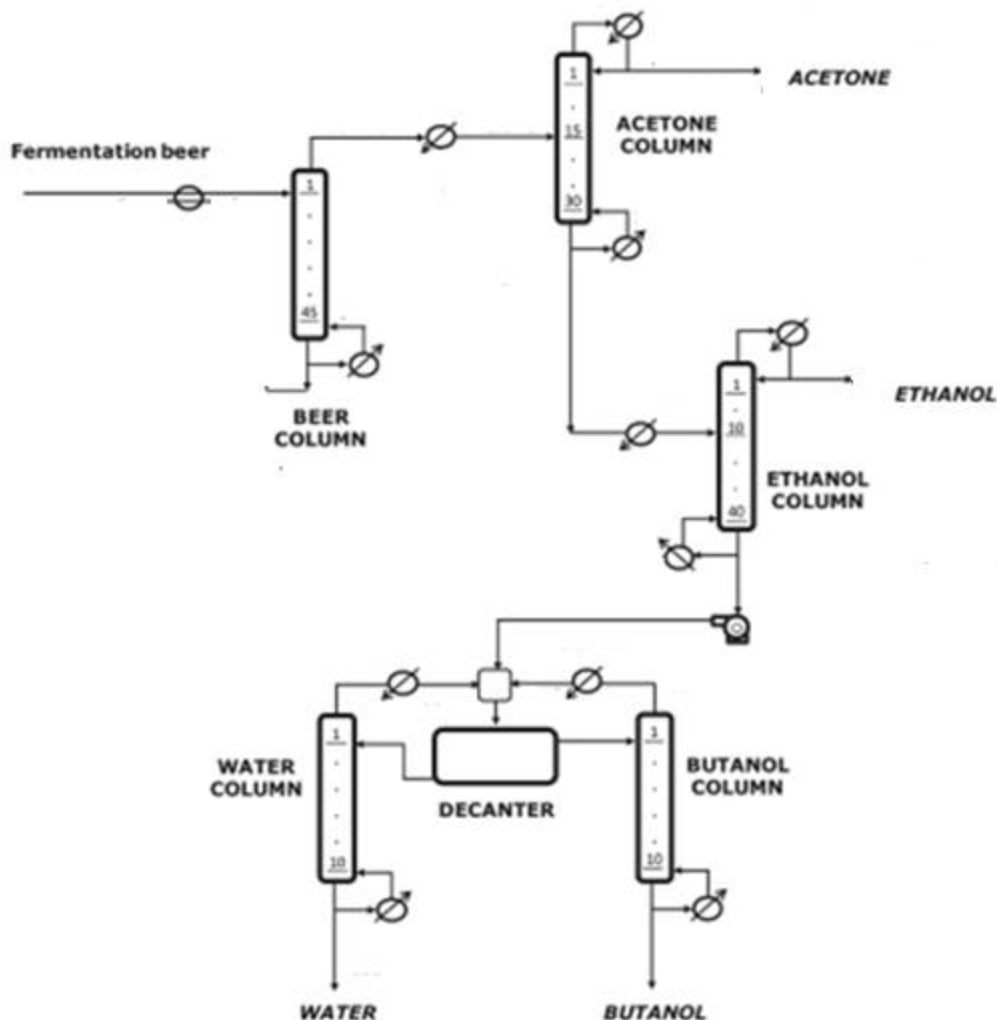


Figura 6. Tren de separación ABE- Torres de destilación en serie.

El objetivo de la primera torre de destilación es retirar por colas la mayor cantidad de agua posible de tal manera que la acetona, el butanol y el etanol salgan íntegramente como destilado.

En la segunda torre se separa totalmente por cabezas la acetona, con el grado de pureza deseado para su posterior venta.

La tercera torre tiene la misión de retirar todo el etanol posible. Dicho compuesto forma un azeótropo homogéneo con el agua, con lo que para obtenerlo en alta pureza sería necesario estudiar otras posibilidades, a través de una destilación azeotrópica, o con una adsorción mediante tamices moleculares. Sin embargo, este tema está fuera del objetivo del presente TFG, que es la obtención de butanol.

A las dos últimas torres llega una mezcla de butanol y agua, la cual, con una torre simple de destilación, no sería posible separar completamente, porque ambas sustancias forman un azeótropo heterogéneo, como se observa en la figura 7.

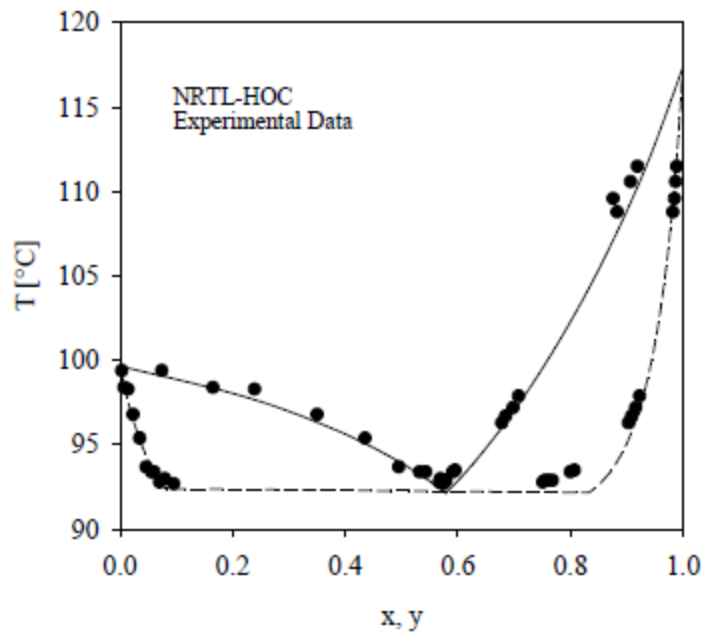


Figura 7. Equilibrio líquido vapor representando la fracción molar de butanol. Sistema butanol-agua a 1 atm. [17].

Para que se haga efectiva la separación, la mezcla de butanol agua se introduce en un decantador. Cada corriente saliente se envía a una torre distinta, donde se obtiene por colas el butanol y el agua respectivamente. Por cabezas se obtiene la mezcla azeotrópica en forma de vapor, la cual se condensa y se envía de nuevo al decantador. Esa recirculación es la que posibilita la separación efectiva de ambos compuestos.

A la hora de hablar de alternativas, se puede hacer una división entre aquellas que consisten en técnicas de separación integradas con la fermentación, también llamadas in-situ, y las que son externas a la fermentación.

4.1. TÉCNICAS DE SEPARACIÓN INTEGRADAS CON LA FERMENTACIÓN (IN-SITU)

Las técnicas integradas son aquellas donde la unidad de separación está combinada directamente con el equipo donde se lleva a cabo la fermentación. Permiten elevar la concentración de butanol, limitando su toxicidad, lo que incrementa su velocidad de producción y mejora la conversión de sustrato. Se necesitan alternativas que puedan reducir el alto coste energético que supone el método de destilación convencional.

4.1.1. Gas de arrastre (Gas stripping)

Asociada a la fermentación ABE, se produce una generación de gases: dióxido de carbono e hidrógeno. Con esta técnica de separación, dichos gases son empleados en la recuperación de los compuestos volátiles, como el butanol, la acetona y el etanol. Son burbujeados en la parte inferior del biorreactor con un difusor, de tal manera que el butanol, la acetona y el etanol son arrastrados y posteriormente condensados, mientras que el hidrógeno y el dióxido de carbono son devueltos al fermentador. [19]. La figura 8, muestra el diagrama de flujo de esta técnica.

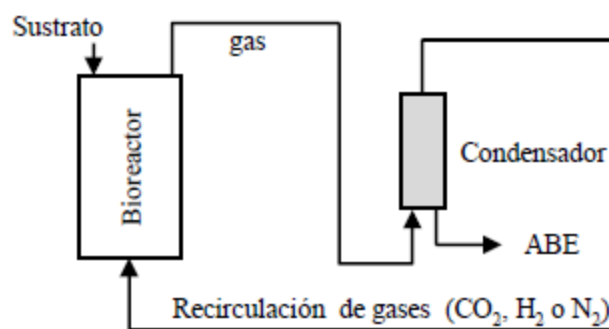


Figura 8. Esquema de separación por gas de arrastre

La principal ventaja radica en la utilización de los gases de fermentación como medio de separación. Sin embargo, el flujo de condensado es muy pequeño en comparación con los flujos de gases, de tal modo el dimensionado industrial supone un problema, al igual que un gran gasto energético.

4.1.2. Adsorción

Es una técnica que consiste en que el butanol quede retenido en un material por el que tiene mayor afinidad que los caldos de fermentación. Es una técnica utilizada a nivel de laboratorio, pero poco efectiva a nivel industrial. El adsorbente puede ser bastante variado, aunque se recomienda el uso de silicalita, una forma poliforma de la sílice que, al ser hidrófobo, repele el agua y favorece la adsorción de butanol. [20]

La configuración del proceso es muy variada: se puede introducir el adsorbente en el fermentador, o se pueden usar columnas externas a la fermentación.

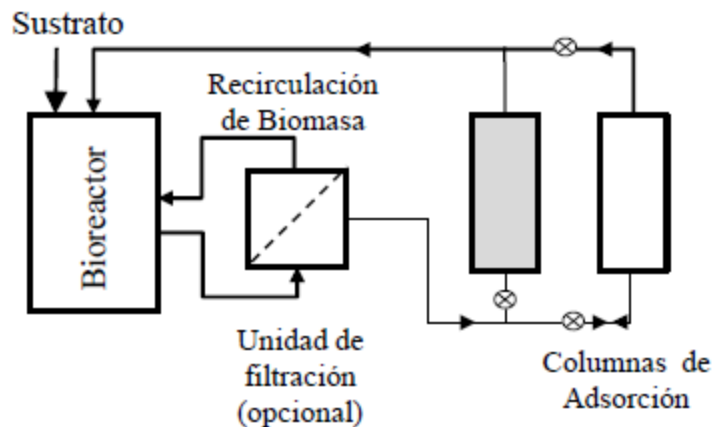


Figura 9. Esquema de separación por adsorción

La eliminación de butanol de los caldos de fermentación mediante adsorción es muy efectiva, por encima del 90% dependiendo de adsorbente utilizado [20]. Sin embargo, su implantación a nivel industrial implica la utilización de grandes cantidades de adsorbente y de varias columnas para mantener la continuidad del proceso, ya que es necesaria una desorción posterior para recuperar el butanol y el resto de componentes adsorbidos. Además, es necesario retirar previamente las células de los caldos para evitar problemas de contaminación del adsorbente. Otro problema inherente a la adsorción es que muchos adsorbentes son capaces también de retener los nutrientes disponibles en el medio, por lo que es necesario aportar nuevos nutrientes en la recirculación de las células para que continúe el proceso de fermentación, hecho que incrementa el coste de operación. [20]

4.1.3. Extracción líquido-líquido

En la extracción líquido-líquido, el solvente mezcla con el caldo de fermentación, y el butanol selectivamente se concentra en la fase orgánica. Debido a que el extractante y el agua son inmiscibles, la fase orgánica después de extraer el butanol, puede ser separada del medio de fermentación, mientras que la fase acuosa se recircula al reactor. En la figura 10 aparece un esquema representativo del proceso.

El agente extractor debe cumplir una serie de requisitos, tales como tener alta capacidad y selectividad para la separación del butanol, debe no ser tóxico para las células (cuando la extracción se realiza dentro del fermentador), debe tener baja viscosidad y una densidad distinta a la del agua y debe estar disponible en el mercado a un precio bajo. [21]. Se suele utilizar alcohol oleico debido principalmente a su escasa toxicidad.

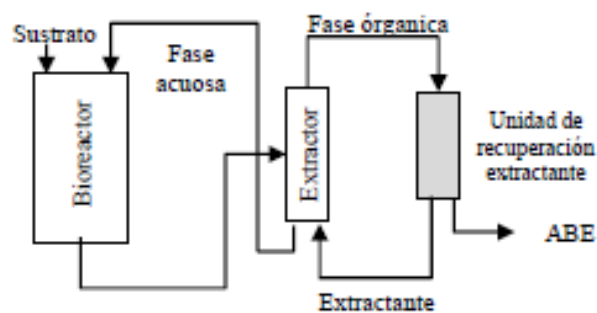


Figura 10. Esquema de extracción líquido-líquido

Se trata de la técnica de separación que menos energía necesita, lo cual es una gran ventaja, además de que no es necesario retirar las células para que se desarrolle correctamente. Sin embargo, la fermentación extractiva in situ para la producción a gran escala, no es tan recomendable como la extracción no integrada dentro del biorreactor debido a:

- Difícil control del proceso.
- Formación de emulsiones.
- Inhibición celular por el extractante.
- Pérdidas de células en la interfase que dificulta la transferencia de materia.

4.1.4. Perstracción

Es una técnica que permite eliminar algunos de los problemas asociados con la extracción líquido-líquido. Se trata de colocar una membrana entre el caldo de fermentación y el agente extractor. Como no hay contacto directo los problemas de toxicidad, emulsiones y acumulación de células de la interfase disminuyen considerablemente. La figura 11 muestra un esquema de esta alternativa.

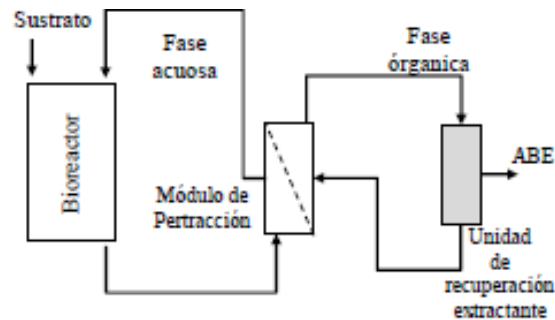


Figura 11. Esquema de separación por Perstracción

El butanol difunde preferiblemente a través de la membrana líquida, mientras que otros componentes de fermentación y productos intermedios (por ejemplo, ácido acético y butírico) se mantienen en la fase acuosa. [22]. El flujo total de butanol desde el medio de fermentación a la fase orgánica, depende principalmente de la permeabilidad del butanol en la membrana. Por lo cual, la membrana representa una barrera física que limita la velocidad de extracción del butanol. Además, si usamos el alcohol oleico como agente extractor, supone un problema ya que la membrana es más sensible a ser desgastada y puede formar finas capas que la hacen más propensa al ensuciamiento.

4.1.5. Pervaporación

Es una técnica que permite la separación selectiva de componentes volátiles de los caldos de fermentación, en el caso de una fermentación ABE, butanol, acetona y etanol, utilizando una membrana. [23]. Dicha membrana se encuentra en contacto con el caldo de fermentación, los componentes volátiles difunden a través de ella como vapor, que se recogen en un posterior condensador. La fuerza impulsora de la transferencia de materia a través de la membrana es el gradiente de potencial químico del componente que permea desde el líquido de alimentación hasta el vapor del permeado. Dicha fuerza impulsora se suele producir aplicando vacío en el lado del permeado. La efectividad de la pervaporación se mide con dos parámetros: la selectividad (una medida de la separación de volátiles) y el flujo a través de la membrana. [23]

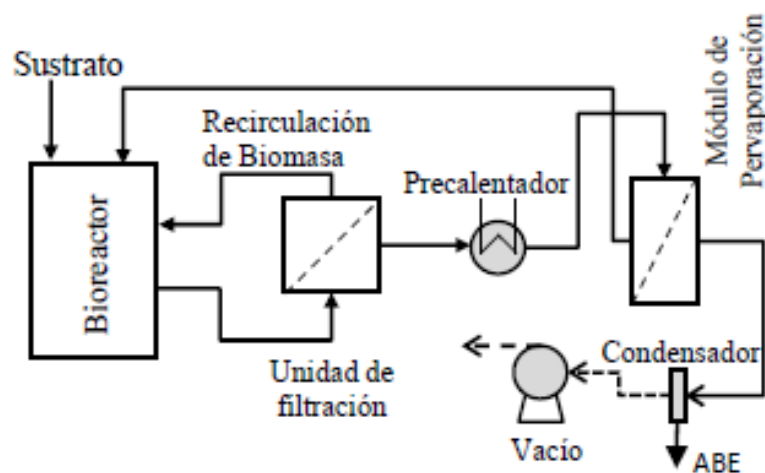


Figura 12. Esquema de separación por Pervaporación

La pervaporación tiene una serie de notables ventajas:

- Permite la eliminación selectiva de los compuestos volátiles del caldo de fermentación, es decir, acetona, butanol y etanol.
- Ocurre un cambio de fase de líquido a vapor de los componentes que atraviesan la membrana. Por tanto, no es necesario evaporar toda la alimentación como en el caso de la destilación.
- Es una técnica adecuada para la separación de azeótropos, para la separación de componentes con un punto de ebullición muy cercano, para la eliminación de sustancias presentes en baja concentración y para separar compuestos sensibles a la temperatura (puesto que, al trabajar con presiones de vacío, el cambio de fase a vapor se produce a temperaturas más bajas).

En cuanto a los inconvenientes, se necesita una gran superficie de membrana, ya que la productividad es algo baja y, como ocurre en todos los procesos con membranas, es necesario retirar las células antes de la separación para evitar problemas de ensuciamiento y colmatación de la misma. Lo que implica una limitación a la hora de su implementación a escala industrial, sin embargo, se está trabajando en ello.

4.1.6. Comparación energética de técnicas de separación integradas con fermentación.

La tabla 3 recoge los consumos energéticos de las técnicas descritas:

ALTERNATIVA	CONSUMO ENERGÉTICO
DESTILACIÓN CONVENCIONAL	30000 kcal/kg butanol
GAS DE ARRASTRE	5220 kcal/kg butanol
PERVAPORACIÓN	3295 kcal/kg butanol
EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO	2119 kcal/kg butanol
PERSTRACCIÓN	2119 kcal/kg butanol
ADSORCIÓN	1948 kcal/kg butanol

Tabla 3. Consumo energético de cada alternativa de separación in-situ. [20].

Se aprecia como la que mayor consumo energético supone es la destilación convencional. El usar técnicas integradas permite optimizar la separación en este sentido.

La técnica que está ahora siendo más investigada por todas sus ventajas es la pervaporación. Además, su consumo energético no es excesivamente alto.

4.2. TÉCNICAS DE SEPARACIÓN NO INTEGRADAS CON LA FERMENTACIÓN

En esta estrategia el caldo de fermentación se lleva directamente a la etapa de separación, completamente independiente de la etapa de fermentación. Este será el método que se usará en la simulación del proceso de separación de solventes ABE

Se buscan alternativas a la separación convencional mediante torres de destilación.

4.2.1. Destilación híbrida

Se trata de una extracción líquido-líquido, similar a la ya comentada en las técnicas in-situ. Sin embargo, aquí se recoge el caldo de fermentación y se lleva al tren de separación. Este consiste en una primera torre donde se ponen en contacto a contracorriente el caldo de fermentación y el agente extractor. Por cabezas sale el solvente rico de los componentes más volátiles, es decir la acetona, el butanol y el etanol además de agua y por colas sale el resto del agua.

Este líquido se lleva a una torre de destilación para recuperar por colas el solvente, que será recirculado a la primera torre, el destilado consiste en una mezcla de productos ABE y agua. A partir de aquí, el proceso es exactamente igual a la destilación convencional, separando en torres sucesivas la acetona y el etanol, y por último el butanol y el agua mediante las dos torres conectadas al decantador. [24].

En la figura 13 se muestra un diagrama de flujo de este sistema de separación.

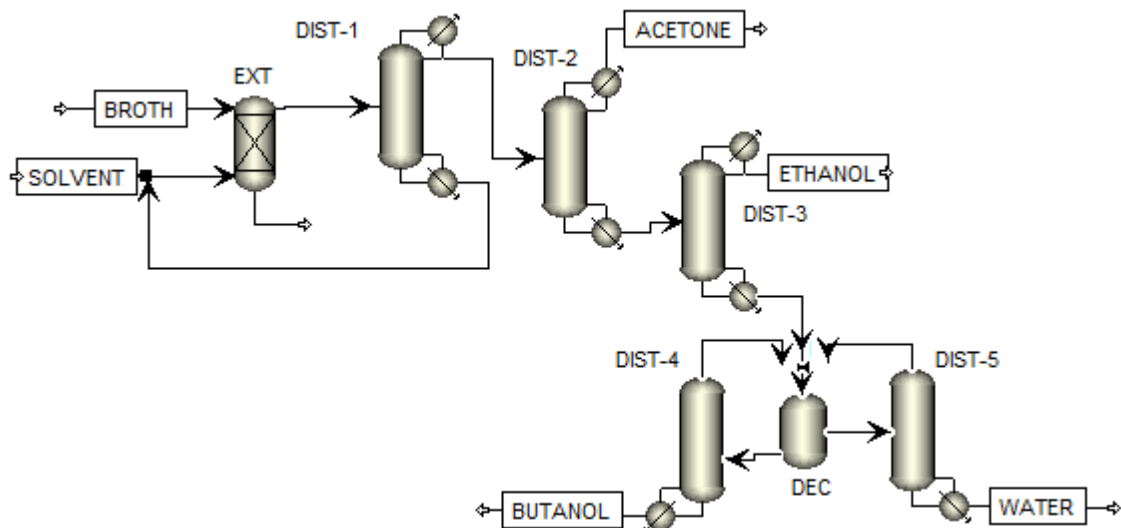


Figura 13. Diagrama de flujo de destilación híbrida

Esta alternativa tiene una clara ventaja sobre la destilación convencional, ya que se retira la mayor parte del agua en la columna de extracción, y no a través de una columna de destilación, que supone un gasto energético mayor. Sin embargo, es necesario una torre adicional para retirar el solvente.

Se está investigando la optimización de este proceso y el agente extractor a utilizar. Si bien lo más común es el alcohol oleico, diversos estudios demuestran que el Mesitileno (1,3,5 trimetilbenceno) puede mejorar sus resultados. [21].

En la tabla 4 se comparan los coeficientes de distribución, D, tanto del mesitileno como del alcohol oleico, para la acetona el butanol y el etanol. También se indica la solubilidad en agua. La información se ha tomado de trabajos experimentales publicados. [21]

PROPIEDADES	MESITILENO			ALCOHOL OLEICO
	UNIFAC 25 °C	25°C	80°C	30°C
D BUTANOL (kg/kg)	1.3	0.76	2.2	3.8
D ACETONA (kg/kg)	1.4	0.43	0.83	0.34
D ETANOL (kg/kg)	0.14	0.03	0.1	0.28
SELECTIVIDAD	7620	1650	4760	330
SOLUBILIDAD DEL DISOLVENTE EN AGUA (%w/w)	0.0027	0.0052		0.0019
VISCOSIDAD(mPa/s)		0.66		26
Tª EVAPORACIÓN (°C)		165		360

Tabla 4. Comparación de propiedades para dos solventes distintos [21]

La primera columna muestra las propiedades del mesitileno según UNIFAC, un método de predicción de propiedades para mezclas no ideales.

Si se compara el alcohol oleico con el mesitileno a 80°C, el primero tiene unos coeficientes de distribución respecto al butanol superiores, lo que a priori indica que puede ser una alternativa más adecuada. Sin embargo, la selectividad es mucho menor, lo que provoca que se tenga que utilizar una mayor cantidad de alcohol oleico, lo que podría encarecer el proceso.

En la tabla 5, se comparan los resultados obtenido en la bibliografía tras operar con el alcohol oleico y con el mesitileno:

DISOLVENTE	FLUJO DEL DISOLVENTE (kg/h)	DEMANDA ENERGÉTICA TOTAL (MJ/kg Butanol)
MESITILENO	383	5.7
ALCOHOL OLEICO	738	15

Tabla 5. Comparación de la demanda energética para distintos disolventes. [21]

Según los estudios experimentales, se optaría por la utilización de mesitileno, ya que requiere menos cantidad, y la energía requerida es mucho menor.

Estos resultados corresponden a una relación Butanol:Acetona de 2:1 en el caldo de fermentación.

4.2.2. Gas de arrastre

Técnica completamente idéntica a la expuesta en el apartado de separación integrada, solo que ahora no se usan los gases de la fermentación como el CO₂, sino que se utiliza otro agente externo. Los más comunes son el aire o el nitrógeno puro. En la figura 14 se muestra el diagrama de flujo de esta alternativa de separación. [24].

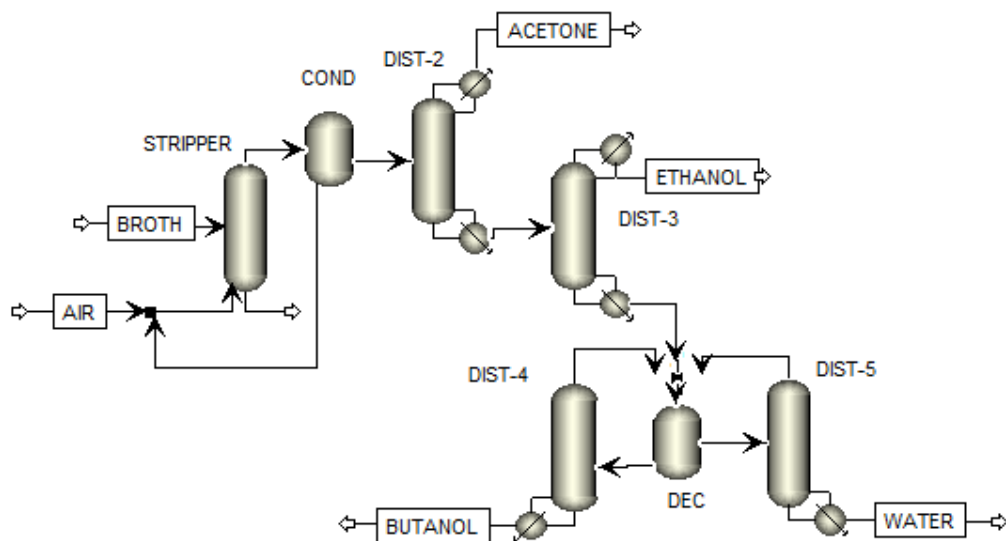


Figura 14. Diagrama de flujo de la técnica de gas de arrastre

En la primera columna se ponen en contacto el caldo de fermentación junto con el aire o nitrógeno en contracorriente. El objetivo de esta columna es retirar la mayor parte de agua por colas, de tal manera que los compuestos ABE, se transfieran a la fase gas, que sale por cabezas. Esta corriente se condensa parcialmente de tal manera que se pueda retirar todo el aire de la corriente principal, y se pueda recircular a la primera torre. El flujo condensado, compuesto por agua y productos ABE, se lleva a las torres de destilación de acetona, etanol y butanol-agua, que operan del mismo modo a lo descrito anteriormente.

La ventaja sobre la destilación convencional, es que el gasto energético implicado en eliminar una gran cantidad de agua es mucho menor. Sin embargo, es necesario hacer un análisis del flujo de la corriente gaseosa de alimentación, para optimizar el calor dispuesto en la condensación.

4.2.3. Resumen

Las dos técnicas descritas, destilación híbrida y gas de arrastre, son las alternativas a la destilación convencional, más utilizadas a escala industrial como método de separación no integrado para la recuperación de solventes ABE.

El presente TFG está enfocado en la simulación de las alternativas de separación no integradas, mediante el software de simulación de procesos ASPEN-PLUS®, para evaluar los requerimientos energéticos de esta etapa del proceso de producción de biobutanol. Se ha partido de la composición de un caldo de fermentación obtenido a escala de laboratorio a partir de un hidrolizado de bagazo de cerveza mediante fermentación con *C. beijerinckii*.

5. SIMULACIÓN DE ALTERNATIVAS CON ASPEN-PLUS®

5. SIMULACIÓN DE ALTERNATIVAS CON ASPEN-PLUS®

5.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS. USO DE ASPEN-PLUS®

ASPEN-PLUS® es un simulador de procesos muy potente, utilizado para el modelado de procesos químicos, farmacéuticos y de refino de petróleo.

La simulación de procesos permite predecir el comportamiento de un proceso utilizando relaciones básicas de ingeniería, como balances de masa y energía, equilibrio químico y de fases.

Mediante datos termodinámicos fiables, condiciones de operación realistas y modelos rigurosos de equipos, es posible simular el comportamiento de una planta industrial. Con la simulación se pueden mejorar los diseños de futuras plantas o aumentar el rendimiento de las ya existentes.

Para convertir un proceso en una simulación de ASPEN-PLUS®, es necesario:

- Especificar los componentes químicos que participan en el proceso. Se pueden definir manualmente o partir de la base de datos.
- Especificar los modelos termodinámicos que representan las propiedades físicas de los componentes y sus mezclas en el proceso. Estos modelos están integrados en el software.
- Definir el diagrama de flujo del proceso.
- Especificar los caudales y condiciones termodinámicas de las condiciones de entrada.
- Especificar las condiciones de operación de los equipos.

ASPEN-PLUS® permite cambiar la configuración del diagrama de flujo, las condiciones de operación o la composición de la alimentación de manera que sea posible analizar alternativas de proceso. Además, es posible realizar gran variedad de tareas, como estimar propiedades físicas, generar resultados gráficos y tabulares, u optimizar el proceso.

Mediante esta herramienta de simulación, se ha conseguido estudiar varias alternativas de separación y purificación de butanol a partir de un caldo de fermentación ABE. Se han utilizado una serie de técnicas que ofrece ASPEN-PLUS®, para optimizar el proceso y hacer más eficaz su implementación en el simulador, las cuales son:

- *Design specifications*. Técnica que se ha utilizado para fijar las concentraciones a la salida de cada torre de destilación, variando el flujo de cabezas (o colas) y la relación de reflujo externa de la torre (L/D). También se ha utilizado en otros equipos, como equipos flash o condensadores, donde variando la temperatura de salida, se cumpla una condición de concentración.

- *Sensitivity analysis*. Técnica que permite estudiar la variación de una variable, flujo o cualquier propiedad, en función del cambio, dentro de un rango, de otra. Se despliegan los resultados en forma de tablas y gráficas, y permiten elegir el punto óptimo de operación. Se ha utilizado para ver el plato de alimentación en cada torre, de tal manera que se minimice el gasto energético, garantizando la separación deseada.

- *Optimization*. Técnica que permite maximizar o minimizar cualquier parámetro de operación, variando otro relacionado con él. Se ha utilizado para el cálculo de flujo de solventes externos con el objetivo de maximizar la recuperación del butanol en la fase de separación. También ha sido usado para establecer la temperatura y presión de operación de la torre de extracción líquido-líquido y de gas de arrastre para maximizar la recuperación de butanol.

- *Calculator*. Técnica que permite relacionar variables mediante igualdades matemáticas. El usuario elige las variables que el simulador debe importar al correr la simulación, y aplicando la fórmula establecida, asigna el valor a la variable que se desea calcular. Se ha utilizado para establecer que las presiones a la entrada sean iguales a las que trabajan las columnas.

Por último, para establecer las secuencias de separación se ha hecho uso de los análisis ternarios de componentes, que ofrece ASPEN-PLUS®, a través de los diagramas de residuos. En los cuales, fijando la presión de operación, se establece en el diagrama ternario, los azeótropos y zonas de inmiscibilidad. A partir de las composiciones obtenidas de los datos de las corrientes, se pueden establecer secuencias de separación, en función de las volatilidades de los componentes.

5.2. BASES DE DISEÑO

5.2.1. Corriente de alimentación

La corriente de alimentación con la que se va a comenzar a simular se recoge en la tabla 6:

STREAM NAME	Units	FEED
Fase		Liquid
Temperature	°C	25
Pressure	atm	1
Mole Flows	kmol/h	550,92
BUTANOL	kmol/h	1,09
ACETONA	kmol/h	0,35
AGUA	kmol/h	549,49
Mole Fractions	kmol/kmol	
BUTANOL	kmol/kmol	1,98E-03
ACETONA	kmol/kmol	6,30E-04
AGUA	kmol/kmol	0,997
Mass Flows	kg/h	10000,00
BUTANOL	kg/h	80,66
ACETONA	kg/h	20,16
AGUA	kg/h	9899,18
Mass Fractions	kg/kg	
BUTANOL	kg/kg	8,07E-03
ACETONA	kg/kg	2,02E-03
AGUA	kg/kg	0,990
Volume Flow	L/min	168,03

Tabla 6. Corriente de alimentación.

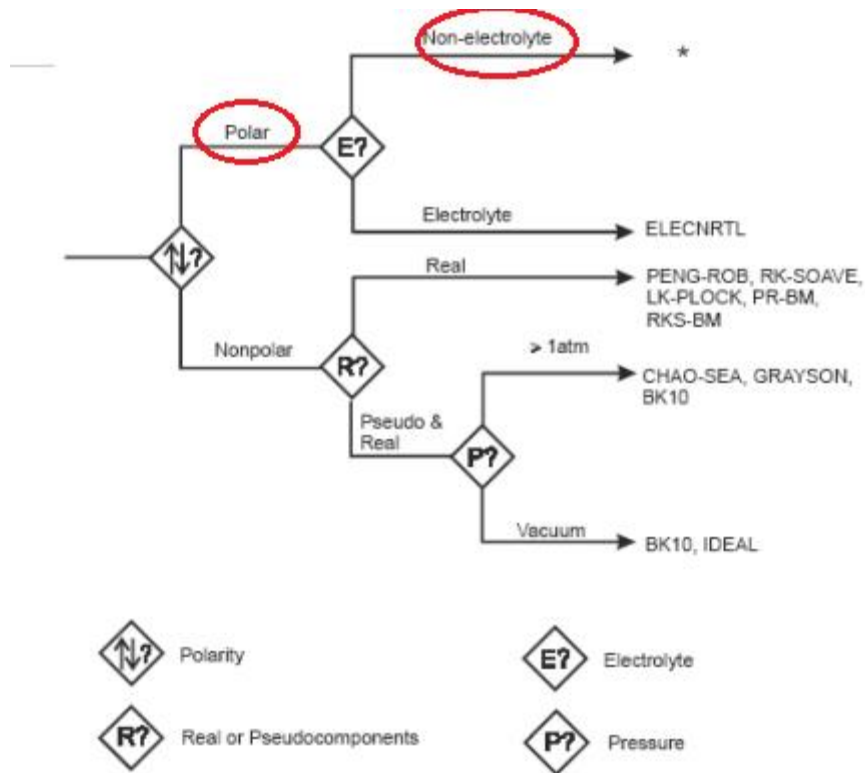
Se trata de un caldo de fermentación ABE, obtenido a partir de un hidrolizado de bagazo de cerveza. Las concentraciones de butanol y acetona son 8 g/L y 2 g/L respectivamente. Los datos han sido tomados de trabajos experimentales llevados a cabo por el GIR Tecnología de Procesos Químicos y Bioquímicos.

5.2.2. Corrientes de productos y subproductos

Como productos, se van a obtener butanol y acetona con una pureza mínima del 99.5% en masa. Se trata de una composición mínima para ponerlo a la venta. El precio de cada producto será calculado de tal manera que se garantice la misma tasa de rentabilidad para cada alternativa.

5.2.3. Propiedades termodinámicas

Para el cálculo de propiedades en ASPEN-PLUS®, se ha escogido el método NRTL, ya que como indican las figuras 15-16, es uno de los adecuados al tipo de compuestos presentes en la mezcla a separar: acetona, butanol y agua.



* See the next figure to continue.

Figura 15. Elección de paquete de propiedades para simulaciones en ASPEN-PLUS® (1).

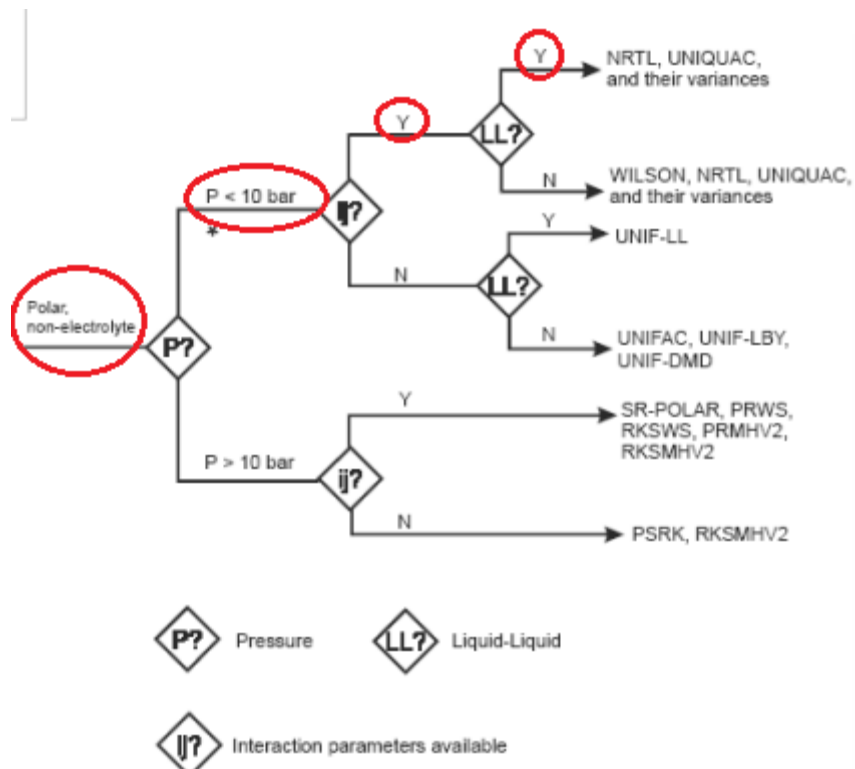


Figura 16. Elección de paquete de propiedades para simulación en ASPEN-PLUS® (2).

5.3. DESCRIPCIÓN DE LAS ALTERNATIVAS

5.3.1. Alternativa 1: Destilación convencional

Primeramente, se va a estudiar el diagrama de residuos de la mezcla acetona, butanol, agua, que aparece en la figura 17, para establecer la técnica más eficiente de separación.

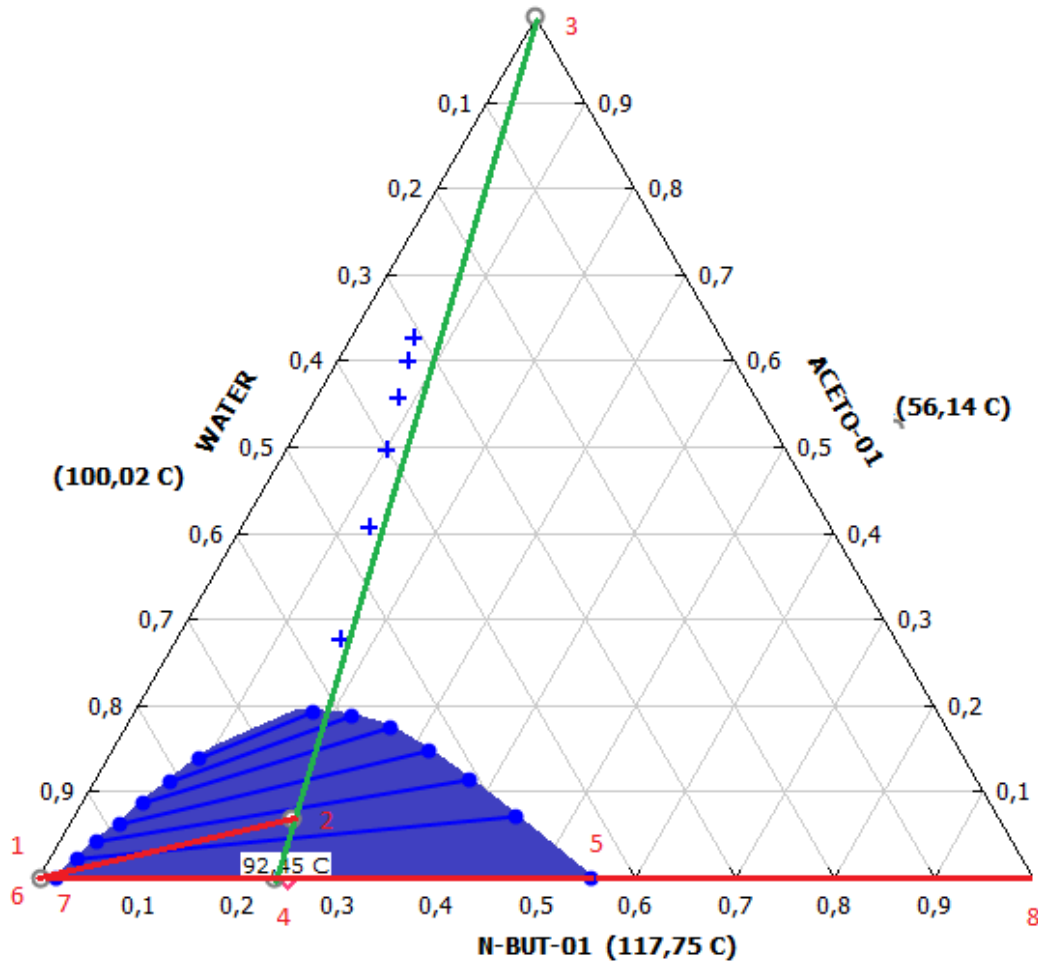


Figura 17. Diagrama de residuos acetona, butanol, agua. Secuencia de destilación.

El diagrama está dividido en dos zonas de operación, mediante la línea que une el punto de la acetona pura con el azeótropo butanol-agua. No es posible ir de una zona a otra del diagrama mediante torres de destilación.

La alimentación se corresponde con el punto 1. Se comienza con una secuencia indirecta de separación, es decir, separar primeramente los más pesados. De tal manera, se obtiene en la primera torre por colas agua pura, punto 6, y por cabezas la mezcla ternaria, punto 2.

La mezcla correspondiente al punto 2, se separa mediante otra torre, obteniendo por cabezas el compuesto más liviano, la acetona pura, punto 3. Por colas, sale el azeótropo heterogéneo butanol agua, punto 4.

El azeótropo se separa mediante un decantador, aprovechando la inmiscibilidad parcial de sus componentes. Además, ahora será posible trabajar simultáneamente en las dos zonas del diagrama. Se obtienen los puntos 5 y 7.

Mediante las últimas dos torres se consigue separar totalmente el butanol y el agua puros por los fondos de las columnas, puntos 8 y 6 respectivamente.

En ambas columnas se obtiene por cabezas el azeótropo, punto 4, que se recircula al decantador para poder separar todo el butanol.

En la figura 18, se recoge el diagrama de flujo completo de la secuencia de separación. Esta, se describe a continuación:

Se introduce la corriente de alimentación FEED, de 550.92 kmol/h en la primera torre de destilación, WATERC1. Se consiguen separar 546 kmol/h por colas, con una fracción molar de agua de 1, corriente WATER. Por cabezas salen 4.92 kmol/h de una mezcla ternaria, acetona, butanol y agua, corriente ABE.

Posteriormente, el destilado se expande hasta una presión de 0.5 atmósferas, ya que es la presión a la que opera la segunda torre. Se decide trabajar a esta presión ya que requiere menos gastos energéticos. [17].

En la segunda torre, C2, se consigue separar toda la acetona que hay en la corriente, 0.347 kmol/h y una fracción másica de 0.999, corriente ACETONA. En los fondos de la torre se extrae la corriente BUT+WAT, que se corresponde al azeótropo heterogéneo de la mezcla butanol agua.

A continuación, se introduce en el decantador, DEC, en el que se separan las corrientes DEC-BUT y DEC-WAT.

La corriente que alimenta a la torre de separación de butanol, BUTANOLC, contiene un flujo molar de 2.71 kmol/h y una fracción molar de butanol de 0.54. La columna BUTANOLC, se denomina comúnmente torre de stripping, ya que carece de condensador, y el destilado abandona el sistema en forma de vapor.

Se obtiene por colas butanol, con un flujo molar de 1.085 kmol/h y una fracción másica de 0.999. Por cabezas sale el azeótropo, que se condensa en el equipo H1 previo a su recirculación.

La otra torre, WATERC2, opera de la misma manera, retirando agua del sistema con una fracción másica de 0.999.

Para simular recirculaciones en ASPEN-PLUS®, se han definido corrientes de purga, para evitar la acumulación de componentes en el sistema.

En el capítulo de resultados se detallarán todos los datos en relación con los requerimientos energéticos energía y tamaños de equipos. En los anexos, se incluye una tabla con todas las corrientes del sistema (balances de materia) y sus distintas propiedades.

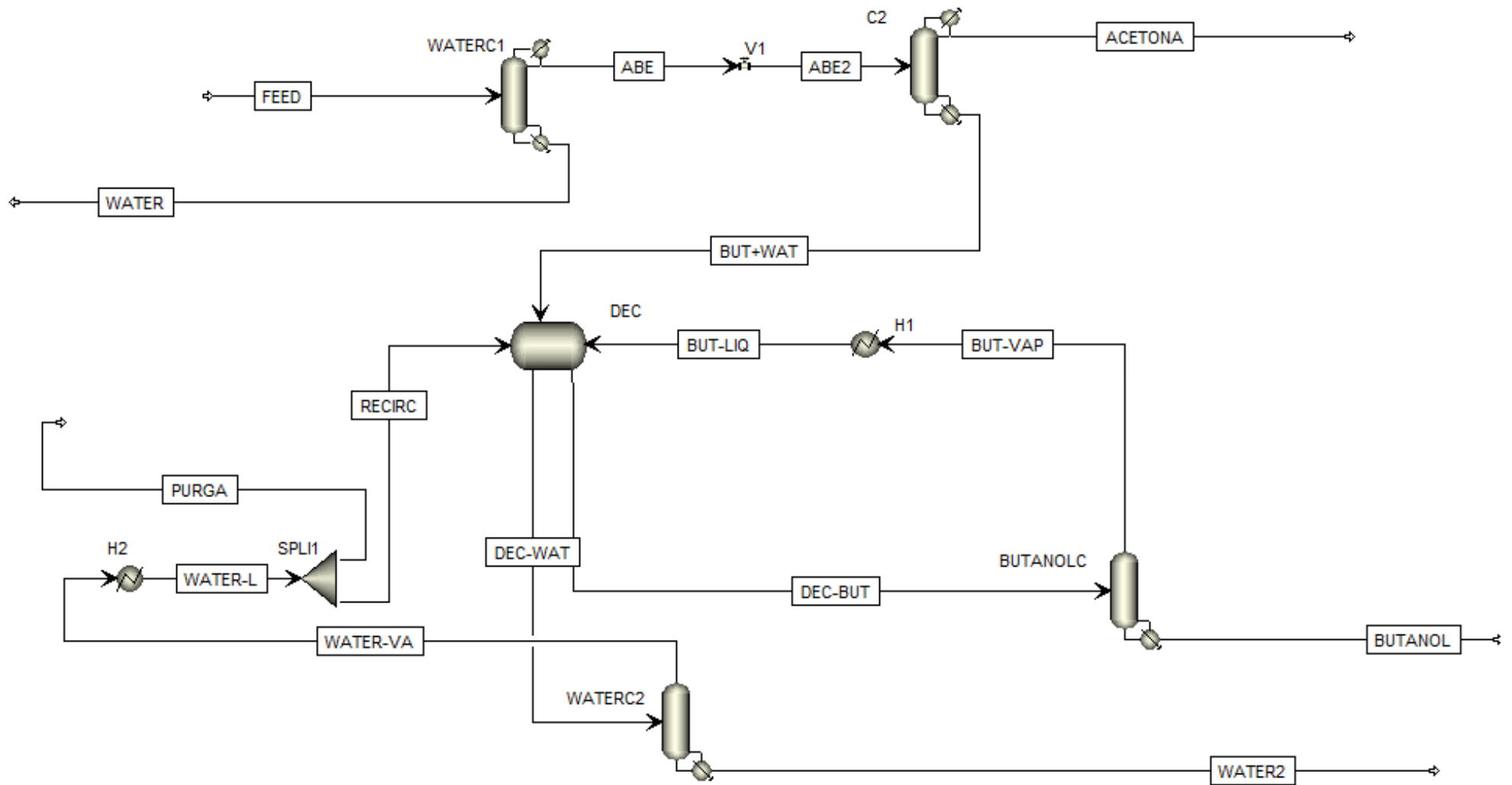


Figura 18. Diagrama de flujo de 1 destilación convencional. ASPEN-PLUS®.

5.3.2. Alternativa 2: Gas de arrastre (Gas stripping)

En la figura 19 se representa el diagrama de flujo de esta alternativa simulada en ASPEN-PLUS®, que se describe con detalle a continuación:

En la primera torre, STRIPPER, se pone en contacto la corriente de alimentación, FEED con el aire, AIR, componente elegido para llevar a cabo esta operación.

Previo a su alimentación a la torre, STRIPPER, ambas corrientes pasan por equipos que aumentan su presión y su temperatura, con el objetivo de maximizar la transferencia de los compuestos volátiles (acetona y butanol), a la fase gas. Se ha establecido la presión de operación de la torre mediante la técnica de optimización, maximizando la recuperación de butanol. Las condiciones a la salida de cada equipo se han establecido de tal manera que las corrientes entren a la misma presión que opera la torre, minimizando el consumo energético

Del mismo modo, se ha calculado el flujo de aire, poniendo como objetivo la máxima recuperación de butanol a la salida de la torre. Todos los datos de las corrientes se encuentran en los anexos.

A la salida de la torre STRIPPER se obtiene una corriente líquida, WATER, de 521,43 kmol/h de agua con una fracción molar de 0.996, siendo el resto aire y trazas de acetona. La corriente gaseosa, AIR+ABE, se introduce en un equipo flash, F1, para separar el aire del butanol y la acetona. Se consigue separar minimizando la energía requerida un 98.9% del aire que se introduce. La corriente V, se recircula a la torre STRIPPER.

Como líquido, corriente L, sale una mezcla de butanol, acetona, agua y trazas de aire. Se introduce este punto en el diagrama de residuos de acetona, butanol, agua, obteniendo como resultado un punto en la misma región de destilación que en la alternativa anterior. Por este motivo, la técnica de separación a partir de ahora es completamente idéntica a la de la destilación convencional a partir de la segunda torre.

La torre ACECOL, que opera a 0.5 atmósferas separa por cabezas una mezcla acetona aire que se consigue purificar mediante un segundo flash, F2. Como líquido, se obtiene la corriente de ACETONA, con un flujo molar de 0.28 kmol/h y pureza de 0.998. La corriente de fondos es una mezcla de butanol agua, mayoritaria en el segundo componente.

Como se consigue separar menos agua en la primera torre respecto al método de destilación convencional, esta corriente no se corresponde con la mezcla azeotrópica, pero está dentro de la zona de inmiscibilidad, con lo que se introduce dentro del decantador DEC. Ambos compuestos se separan del mismo modo que en la destilación convencional, recirculando los azeótropos condensados al decantador.

Finalmente se obtiene un flujo de agua de pureza 0.999, proveniente de la torre WAT-COL. De la torre BUT-COL, se consigue separar un flujo de 1.01 kmol/h de butanol con una pureza de 0.999.

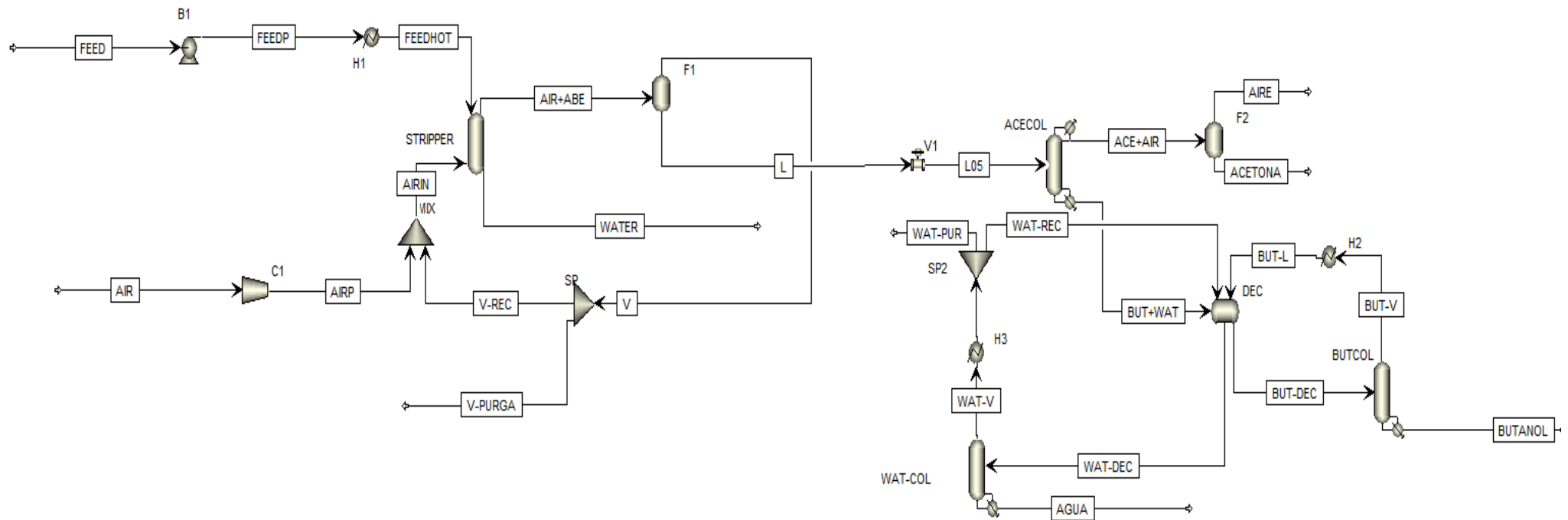


Figura 19. Diagrama de flujo del gas de arrastre. ASPEN-PLUS®

5.3.3. Alternativa 3: Destilación híbrida

En esta alternativa se han simulado 4 configuraciones diferentes de separación. La figura 20, muestra la parte inicial del proceso, común a todas. Posteriormente se analizarán una por una las cuatro configuraciones.

La parte común del proceso de destilación híbrida se describe a continuación:

La primera torre, C1, tiene la misión de llevar a cabo la extracción líquido-líquido de los compuestos volátiles de la alimentación, butanol y acetona, mediante el solvente. Se ha escogido el mesitileno debido a las ventajas que ofrece respecto al alcohol oleico, tal y como se indicó en la tabla 5.

Los dos intercambiadores, H1 y H2, se colocaron con el propósito de optimizar la extracción modificando la temperatura de las corrientes, sin embargo, el efecto es mínimo. Aunque aparezcan en el diagrama, no operan en el proceso y no se tendrán en cuenta a la hora de los análisis posteriores.

La cantidad de disolvente se ha calculado mediante la técnica de optimización de ASPEN-PLUS®, de tal manera que se maximice la recuperación de butanol a la salida de la corriente EXTRACTO.

La corriente EXTRACTO, contiene un flujo de 224.05 kmol/h, de los cuales 1.087 kmol/h son de butanol, es decir, equivale a un 99.99% de recuperación. Se consigue retirar del sistema un 99.8% del agua que entra.

El extracto se introduce en la torre C2, donde se pretende retirar el total o la mayor parte del mesitileno. Esta columna es un punto clave del proceso, porque requiere bastante gasto energético. Se han simulado a partir de aquí 4 sub-alternativas. En dos de ella se separa totalmente el solvente, y la mezcla restante se separa mediante una o dos torres. En las otras dos opciones, se mantiene algo de mesitileno para disminuir la energía requerida en la torre C2. La mezcla restante se separa o bien mediante secuencia directa, o mediante la secuencia indirecta.

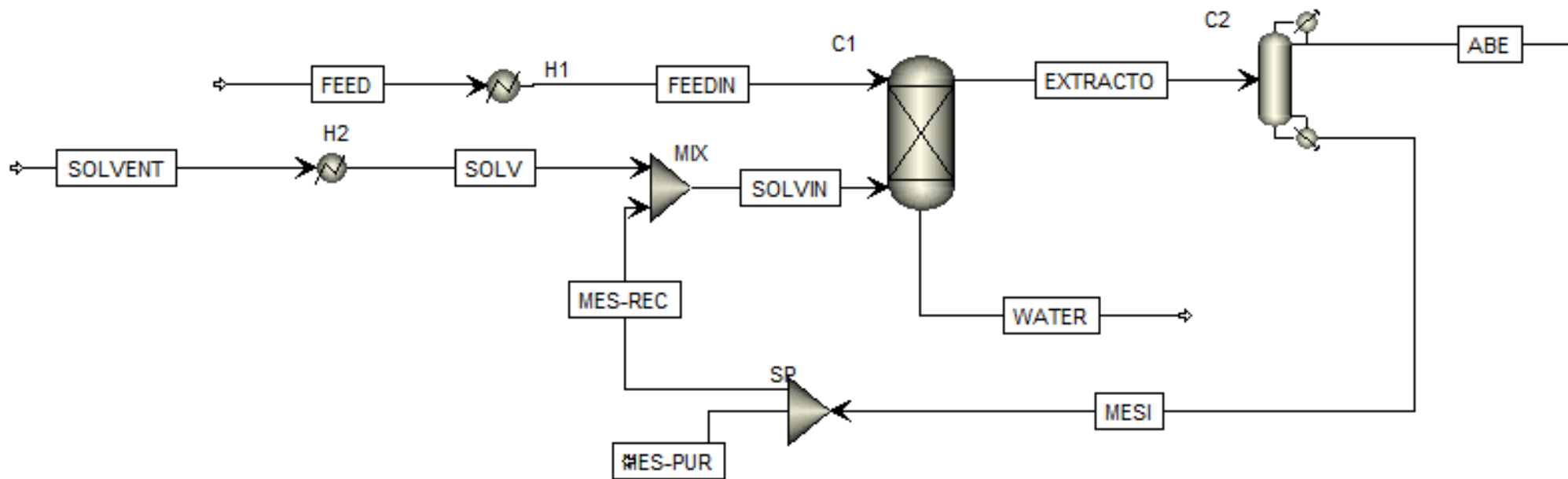


Figura 20. Diagrama de flujo de la destilación híbrida. Parte común a las 4 alternativas. ASPEN-PLUS®

- Alternativa 3.1. Destilación híbrida (configuración 1). Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 2 torres de destilación

En la figura 21, se encuentra el diagrama de residuos de los compuestos acetona, butanol, agua, con el que se ha trabajado para definir la estrategia de separación.

En la figura 22 aparece el diagrama de flujo de la opción en la que se retira totalmente el mesitileno, y la purificación se lleva a cabo mediante dos torres de destilación.

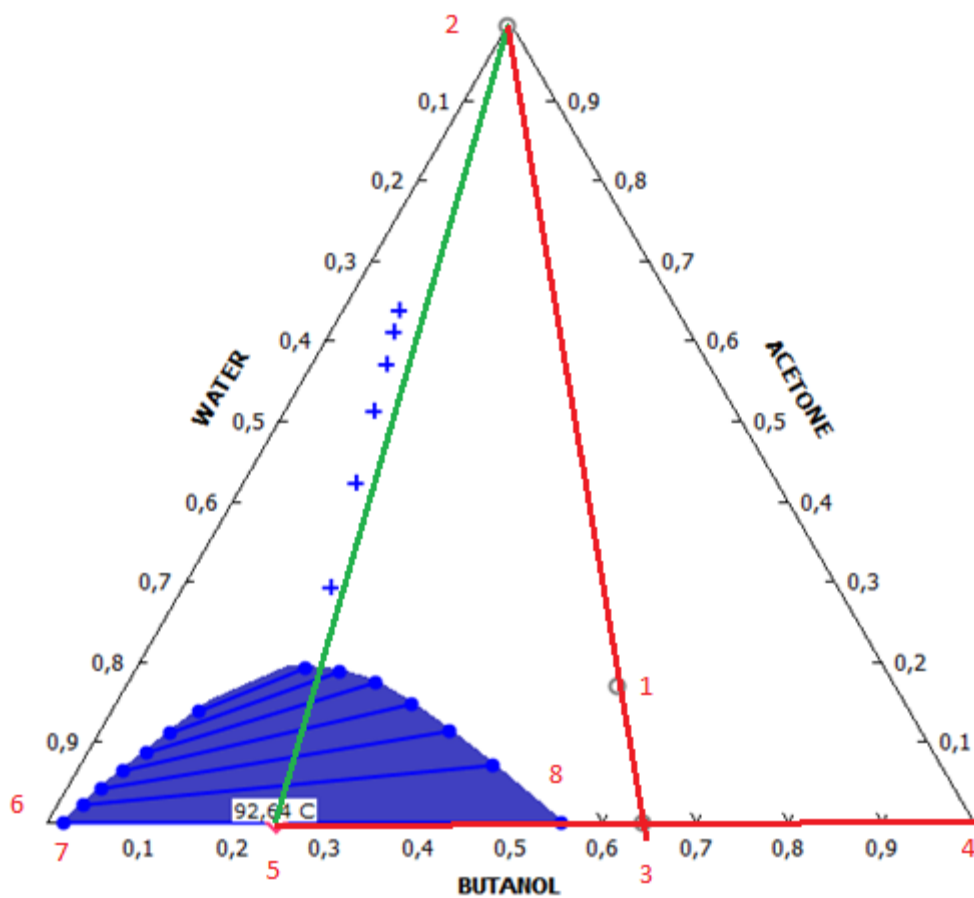


Figura 21. Diagrama de residuos acetona, butanol, agua. Separación de opción 1

La descripción de esta configuración se detalla a continuación:

De la torre C2, abandona por colas la corriente de mesitileno, MESI, que se recircula a la columna de extracción. Como destilado, la corriente ABE, contiene un flujo de 2.02 kmol/h.

El punto 1 de la figura 21, corresponde con la composición de la corriente ABE, la cual se introduce en la torre ACCOL. Como destilado se obtiene una corriente de acetona pura, punto 2 en el diagrama. Contiene un flujo molar de 0.34 kmol/h. Por los fondos de la columna se obtiene una mezcla de butanol agua y trazas de mesitileno, punto 3.

La corriente B+W+M, se introduce en la torre BUTCOL, para obtener butanol con una pureza de 0.999. Como destilado y en forma de vapor, sale la mezcla azeotrópica, punto 5, que se introduce en el decantador previo, DEC, paso por un condensador, H3.

Del decantador salen las corrientes correspondientes a los puntos 7 y 8. La más rica en butanol, B+W-DEC, se recircula a la torre. Como los puntos 8 y 3 están muy próximos, el gasto energético de la torre BUTCOL no se elevan demasiado con la recirculación.

El objetivo de la torre WATCOL, es separar agua en estado puro, y extraerla del sistema.

Esta alternativa permite obtener un flujo de butanol de 1.067 kmol/h con una pureza de 0.999.

- Alternativa 3.2. Destilación híbrida (configuración 2). Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 1 torre de destilación

Esta alternativa es completamente igual a la anterior, salvo que no se utiliza una torre de destilación para obtener agua pura. Es decir, la corriente de salida rica en agua sale directamente del decantador, y no de una columna de destilación. Con esto se consigue eliminar una torre del sistema, lo que económicamente es muy favorable, pero habría que analizar qué hacer con el agua que sale del decantador, ya que contiene una pureza del 0.978, inferior respecto a los anteriores casos.

Así pues, mediante esta técnica se ha conseguido un flujo de 1.065 kmol/h de butanol con una pureza de 0.999.

Véase que la diferencia de flujo con el de la técnica anterior, es pequeña. Los puntos 5,6 y 7 que se representan en la figura 21, son los que se operan en la torre de separación de agua. Aplicando la regla de la palanca, se concluye que el flujo de agua que se obtiene por colas es mucho menor al flujo que sale como destilado.

La figura 23 muestra el diagrama de flujo de esta alterativa.

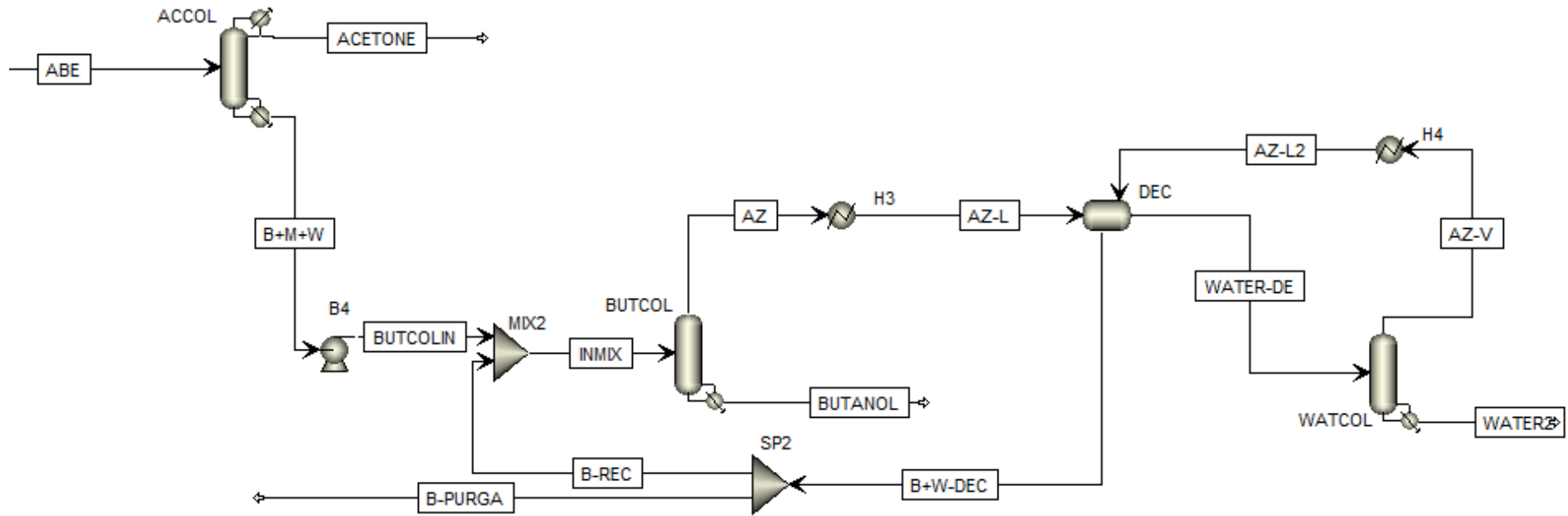


Figura 22. Diagrama de flujo de la opción 1 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®

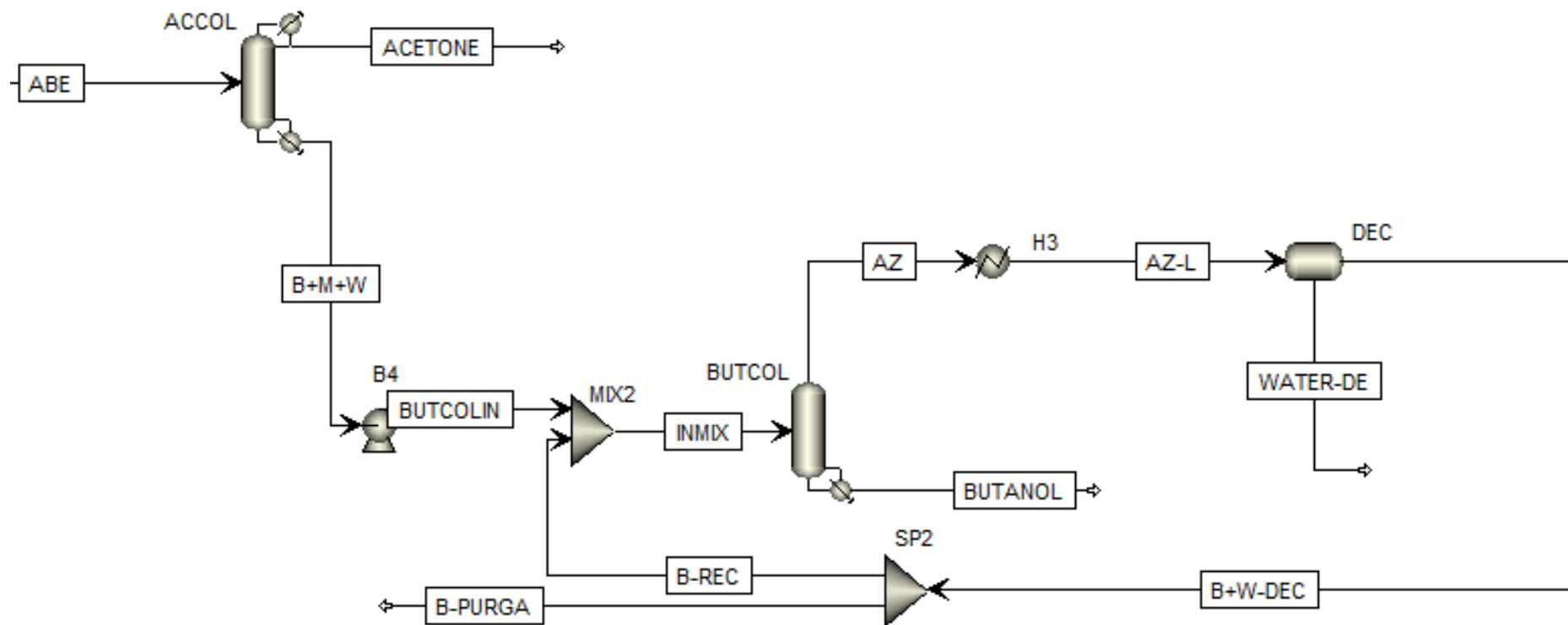


Figura 23. Diagrama de flujo de la opción 2 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®

- Alternativa 3.3. Destilación híbrida (configuración 3). Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia directa

En esta configuración, no se separa completamente el mesitileno en la torre C2. La corriente ABE, contiene un 1.5% de mesitileno, se trata de una mezcla cuaternaria. Se procede a retirar la acetona del sistema mediante la torre ACCOL. Como destilado sale acetona pura con un flujo molar de 0.35 kmol/h. Los fondos de la columna, consisten en una mezcla ternaria butanol-mesitileno-agua.

Para llevar a cabo su separación se analiza el diagrama de residuos que recoge la figura 24.

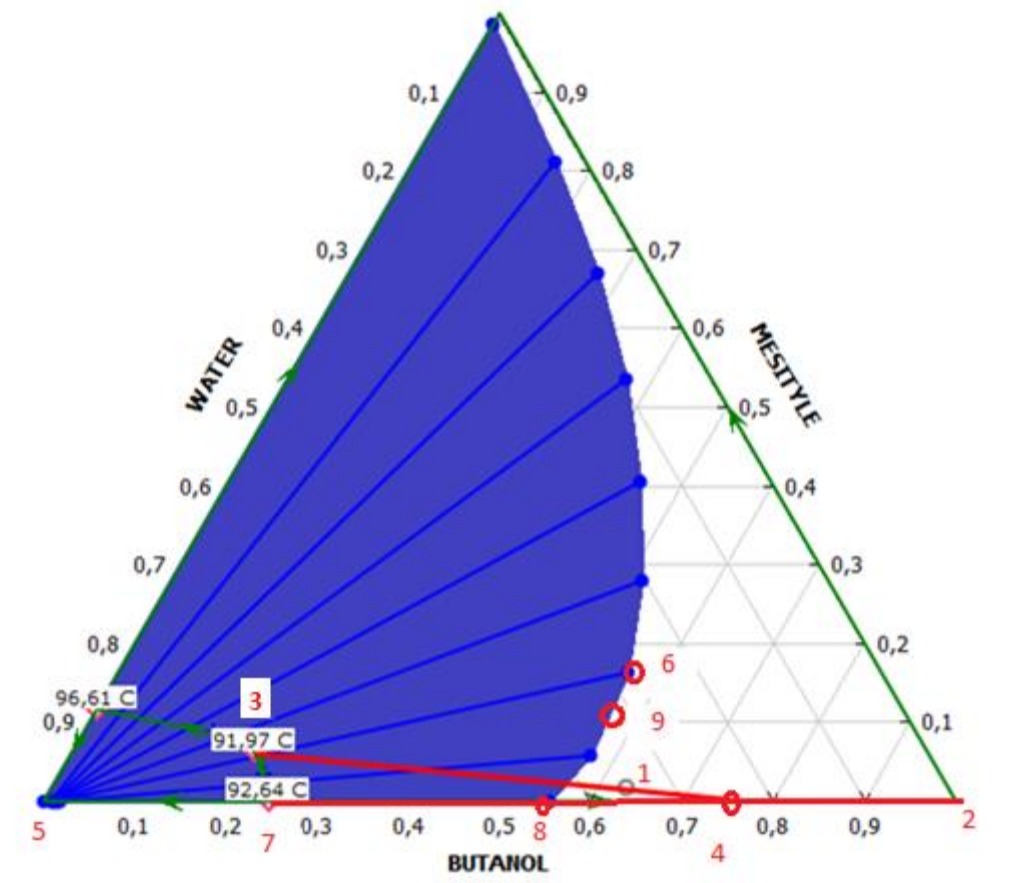


Figura 24. Diagrama de residuos agua, mesitileno, butanol. Secuencia directa de separación.

En la figura 25, se muestra el diagrama de flujo de la tercera opción dentro de la alternativa de destilación híbrida, el cual se describe a continuación:

El punto 1, corresponde con la composición de la corriente B+M+W. La secuencia directa de separación implica retirar los compuestos más volátiles primero, es decir el azeótropo ternario a 91.97°C. La corriente que contiene este componente sale por cabezas de la torre C3, punto 3.

Por colas se obtiene una corriente con la composición que indica el punto 4 del diagrama. Se introduce en la columna BUTCOL y se obtiene por colas el butanol puro. Como destilado y en forma de vapor, sale la corriente AZ-V, azeótropo binario butanol agua, punto 7 del diagrama.

Las corrientes de composición 3 y 7, se introducen en un decantador, y se obtiene la corriente DEC-TORE, punto 9, que se recircula a la torre C3. Del decantador también sale otra corriente rica en agua, punto 5.

Con esta alternativa se consigue un flujo de 1.001 kmol/h de butanol con una pureza de 0.999.

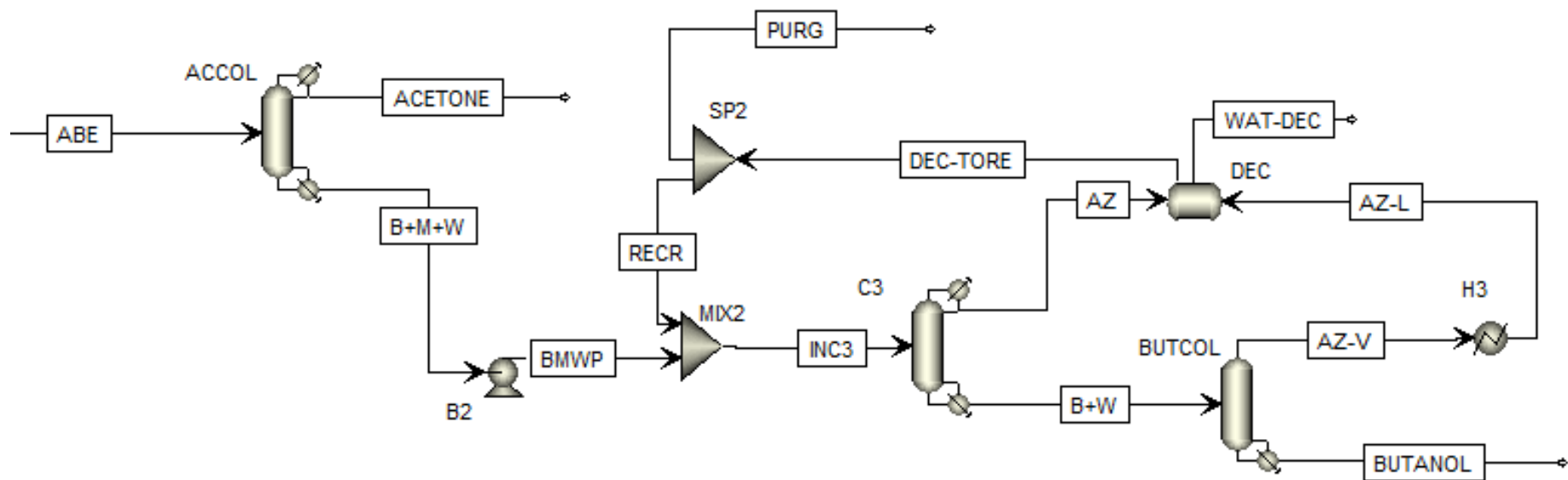


Figura 25. Diagrama de flujo de la opción 4 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®

- Alternativa 3.4. Destilación híbrida (configuración 4). Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia indirecta

La figura 26, muestra la secuencia de separación llevada a cabo. La descripción se detalla a continuación:

La primera parte es completamente igual a la opción anterior. La diferencia radica en la secuencia de separación escogida para operar con el componente 1 del diagrama. En esta alternativa, la secuencia es indirecta, es decir, primero se separan los compuestos más pesados.

La corriente B+M+W se introduce en la torre C3, donde se obtiene por colas mesitileno puro, punto 2. Como destilado se obtiene la mezcla butanol agua reflejada en el punto 3. Se obtiene butanol puro en la columna BUTCOL, y como destilado, la mezcla azeotrópica, punto 5, que se introduce en un decantador previamente condensado.

Del decantador, DEC salen dos corrientes, puntos 6 y 7, siendo este último el que se recircula a la torre C3.

Se consigue obtener un flujo de 1.062 kmol/h de butanol con una pureza de 0.999.

El diagrama de flujo de esta alternativa aparece en la figura 27.

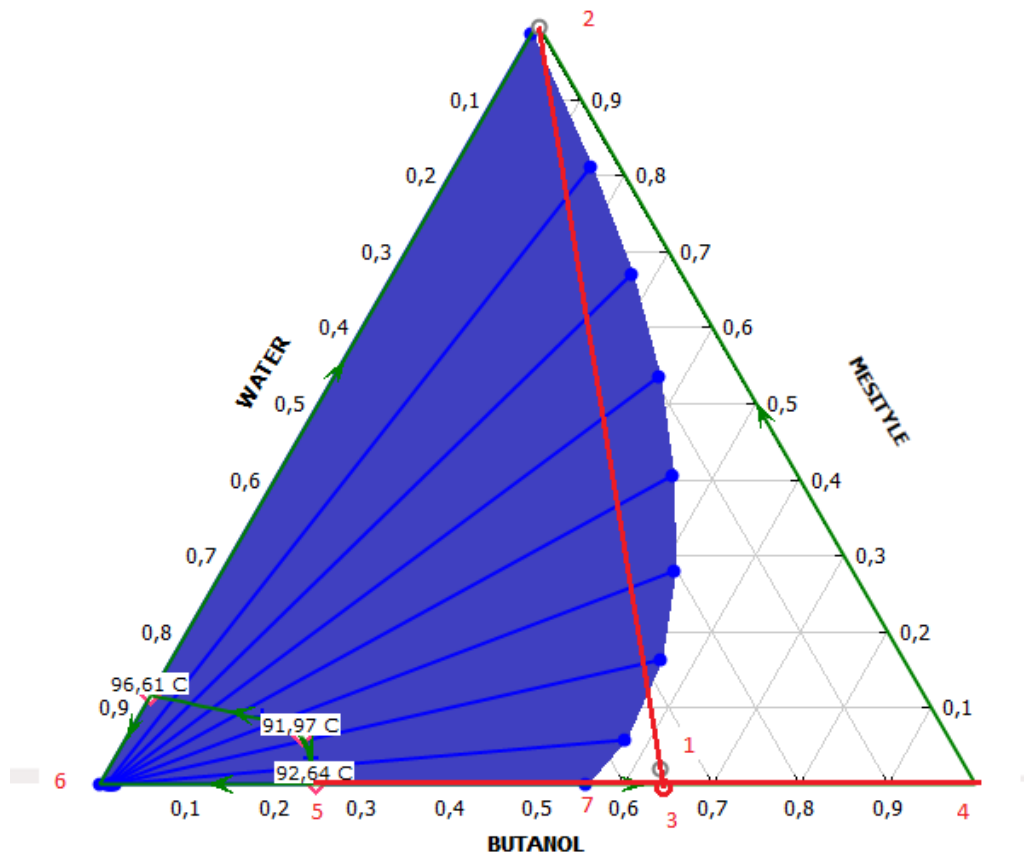


Figura 26. . Diagrama de residuos agua, mesitileno, butanol. Secuencia indirecta de separación.

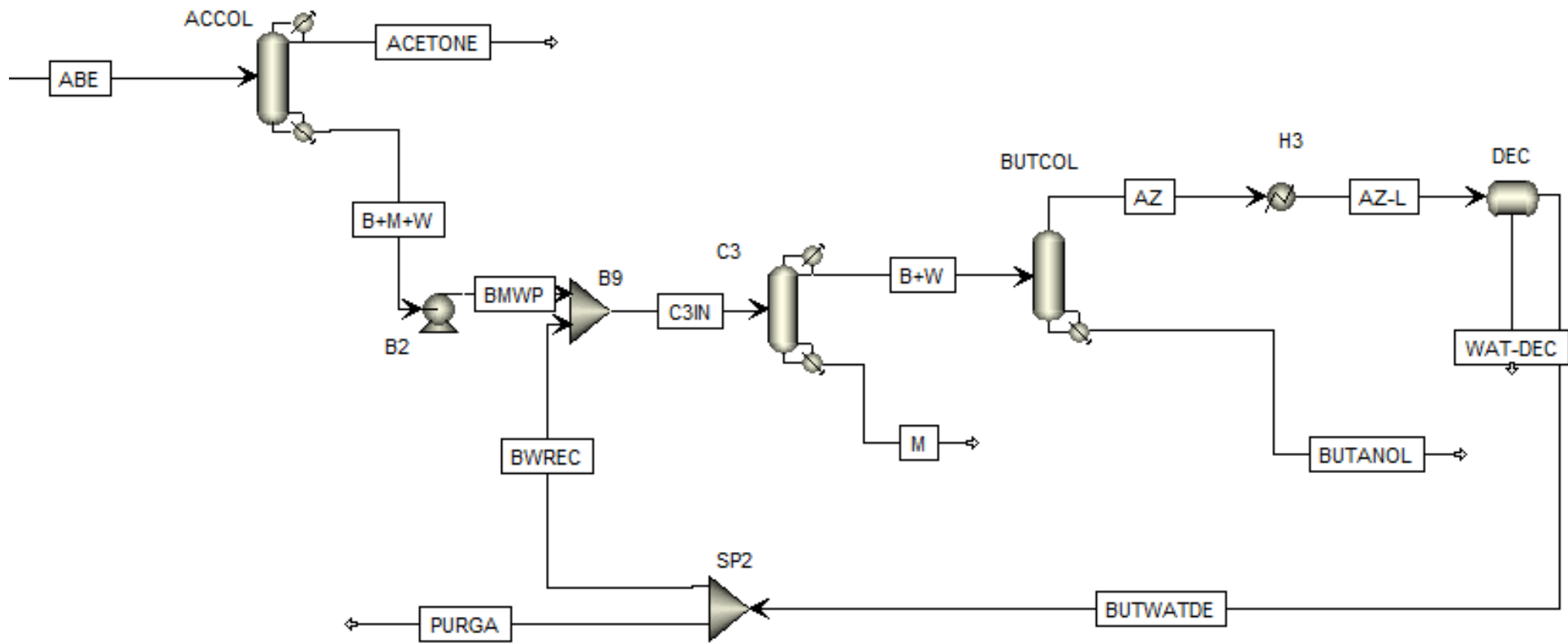


Figura 27. Diagrama de flujo de la opción 4 de la destilación híbrida. ASPEN-PLUS®

5.3.4. Alternativa 4: Separación de butanol sin recuperación de acetona

Estudiando el diagrama de residuos de la acetona, butanol y agua, se ha simulado una nueva alternativa de separación, en la que no se extrae la acetona del sistema como corriente de elevada pureza, sin embargo, se cuenta con la ventaja de solo tener dos torres de destilación.

Mediante la figura 28, se va a explicar esta alternativa de separación:

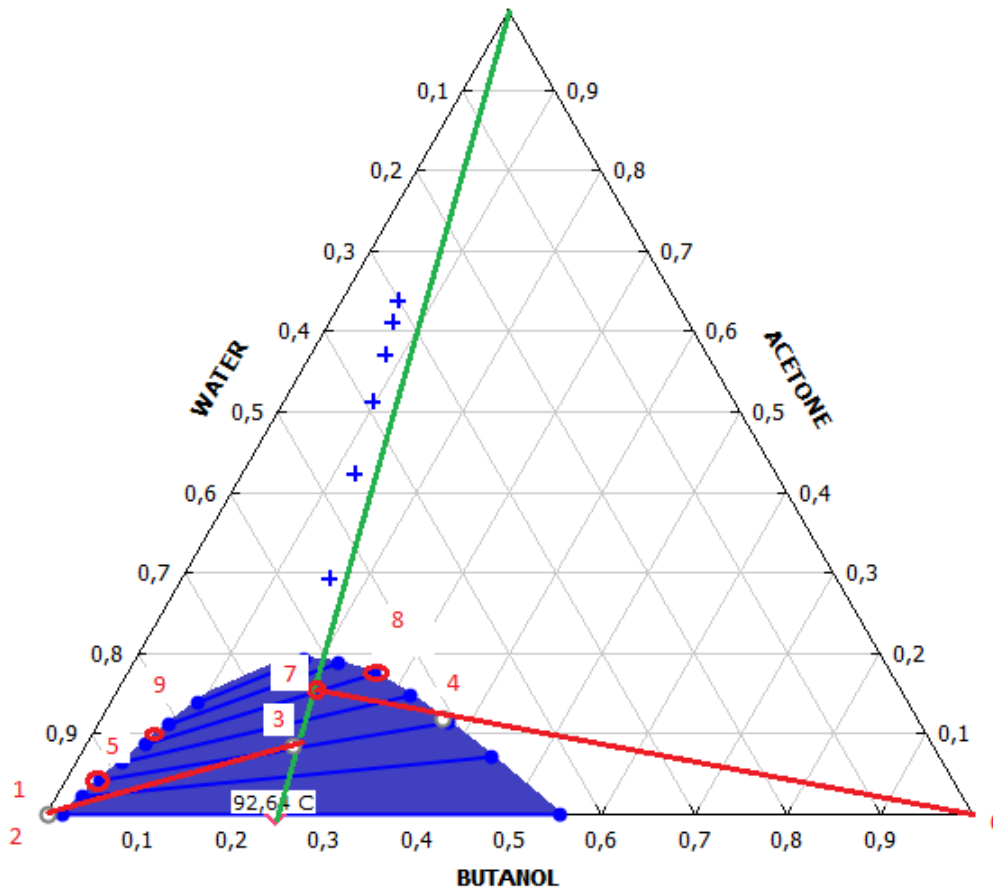


Figura 28. Diagrama de residuos butanol, acetona, agua. Secuencia de separación.

El diagrama de flujo de esta alternativa aparece en la figura 29.

La alimentación del sistema, punto 1, se introduce en la columna WATERC1, que retira por colas la mayor cantidad de agua pura posible, punto 2. Como destilado se obtiene la corriente ABE, cuya composición es la reflejada en el punto 3.

Hasta aquí es exactamente igual a la alternativa de destilación convencional.

La corriente ABE se introduce en un decantador, para obtener las corrientes 2 y 3 en el diagrama, que equivalen a los puntos 4 y 5 respectivamente del diagrama de residuos. La corriente más rica en agua se recircula a la primera columna, mientras que la otra se introduce en la torre BUTCOL, con el objetivo de obtener por colas una corriente pura de butanol.

Como destilado, se obtiene el punto 7 del diagrama, que, tras ser condensado, se envía a un nuevo decantador, DEC2. De este equipo, salen dos corrientes, 5 (punto 8), que se recircula a la torre BUTCOL, y la corriente 6, que abandona directamente el sistema, punto 9.

Con esta alternativa se obtiene un flujo de 0.781 kmol/h de butanol con una pureza de 0.999.

Se observa que es un flujo mucho más pequeño que en los anteriores casos, y a eso se le suma que no se obtiene acetona. Sin embargo, el hecho de solo requerir dos torres de destilación, puede hacer posible que el proceso sea más rentable.

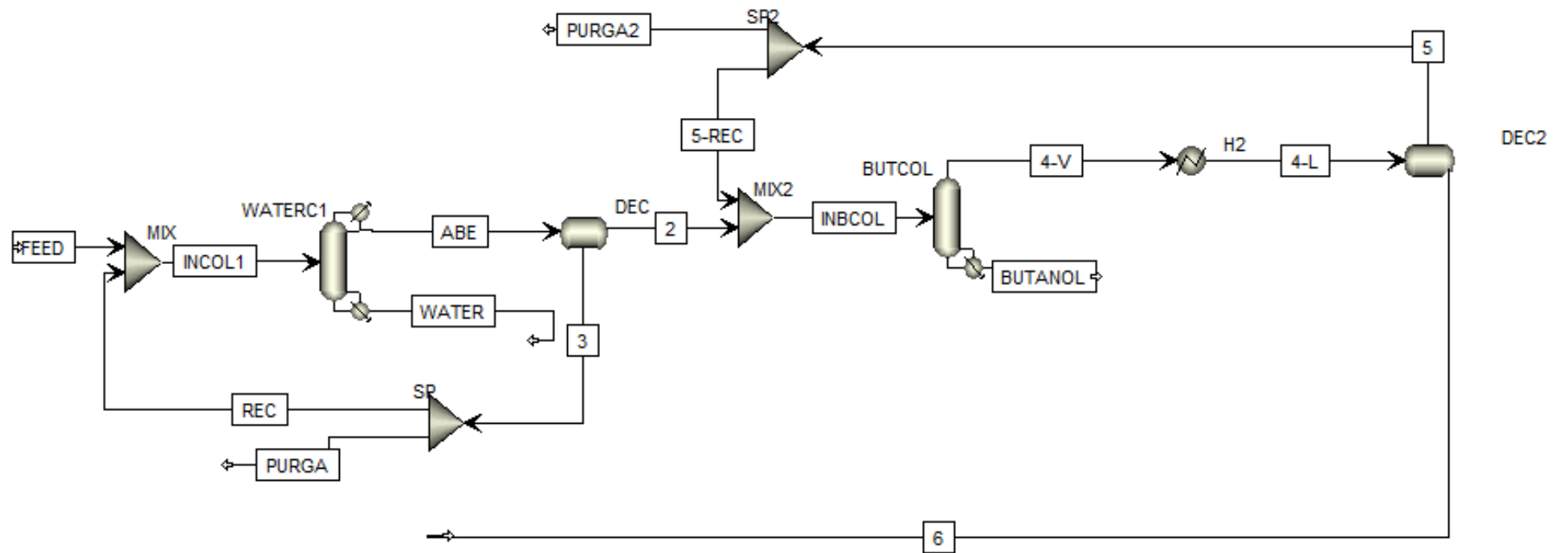


Figura 29. Diagrama de flujo de la alternativa no bibliográfica.

6. RESULTADOS

6. RESULTADOS

6.1. BALANCES DE MATERIA-CORRIENTES DE PRODUCTOS Y SUBPRODUCTOS

En la tabla 7 se muestran los resultados obtenidos en la simulación en cuanto a la separación de butanol y acetona. Se muestran los flujos molares, másicos y volumétricos, fracciones molares y másicas y porcentajes de recuperación.

Se observa que en las distintas alternativas el porcentaje de recuperación es sumamente alto. El más elevado en este sentido es la destilación convencional.

La alternativa en la se plantea recuperar sólo butanol, solamente se obtiene un 71% del butanol que entra al sistema. Habrá que analizar la rentabilidad de esta alternativa, ya que, aunque solo se necesitan dos torres, el flujo de butanol es relativamente bajo, y además no se extrae nada de acetona como producto final.

ALTERNATIVA	FLUJO MOLAR (kmol/h)		FRACCIÓN MOLAR (kmol/kmol)		FLUJO MÁSICO (kg/h)		FRACCIÓN MÁSICA (kg/kg)		FLUJO VOLUMÉTRICO (L/min)		RECUPERACIÓN (%)	
	BUTANOL	ACETONA	BUTANOL	ACETONA	BUTANOL	ACETONA	BUTANOL	ACETONA	BUTANOL	ACETONA	BUTANOL	ACETONA
DESTILACIÓN CONVENCIONAL	1,09	0,35	0,999	0,999	80,45	20,15	0,999	0,999	1,89	0,43	99,8	99,9
GAS STRIPPING	1,02	0,28	0,999	0,997	75,22	16,23	0,999	0,999	0,31	1,76	93,3	80,4
DESTILACIÓN HÍBRIDA (I)	1,07	0,35	0,999	0,994	79,16	20,17	0,999	0,998	1,86	0,43	98,1	99,8
DESTILACIÓN HÍBRIDA (II)	1,07	0,35	0,999	0,994	79,01	20,17	0,999	0,998	1,86	0,43	97,9	99,8
DESTILACIÓN HÍBRIDA (III)	1,00	0,35	0,999	0,990	74,28	20,18	0,999	0,997	1,74	0,43	92,2	99,8
DESTILACIÓN HÍBRIDA (IV)	1,06	0,35	0,999	0,990	78,71	20,20	0,999	0,997	1,85	0,43	97,6	99,9
SEPARACIÓN DE BUTANOL SIN ACETONA	0,78	-----	0,999	-----	57,90	-----	0,999	-----	1,36	-----	71,8	-----

Tabla 7. Corrientes de productos y subproducto

6.2. EQUIPOS: DIMENSIONES Y CONDICIONES DE OPERACIÓN

En este apartado se resumen algunas de las condiciones de operación con las que se han simulado las alternativas de separación, así como las dimensiones de los equipos utilizados, proporcionadas por ASPEN-PLUS®.

ALTERNATIVA1: DESTILACIÓN CONVENCIONAL

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	WATERC1	12	4	6	1	1,06	12,80
	C2	17	13	19	0,5	0,45	17,06
	WATERC2	6	1		1	0,45	8,53
	BUTANOL C	9	1		1	0,45	10,97
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H1	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,37	0,02	6,09	1	1
	H2	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,21	0,025	6,09	1	1
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,91	3,65			

Tabla 8. Equipos. Destilación convencional

ALTERNATIVA 2: GAS DE ARRASTRE

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	ACECOL	24	11	1,37	0,5	0,45	23,16
	WAT-COL	6	1		1	0,45	8,53
	BUTCOL	8	1		1	0,45	9,75
CONDENSADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	F1	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	8,75	0,02	6,09	1	1
	H2	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,32	0,02	6,09	1	1
	H3	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,912	0,02	6,09	1	1
	F2	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,116	0,02	6,09	1	1
I. DE CALOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H1	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	7,09	0,02	6,09	1	1
STRIPPER	TAGNAME	Nº PLATOS	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)		
	STRIPPER	25	4	0,60	25,60		
BOMBA	TAGNAME	PRESIÓN DE SALIDA (atm)	P RATIO	FLUID HEAD (m)	TIPO		
	B1	4	4	33,99	CENTRIFUGAL		
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,91	3,65			
COMPRESOR	TAGNAME	PRESIÓN DE SALIDA (atm)	P.RATIO	DRIVER			
	C1	4	4	MOTOR			

Tabla 9. Equipos. Gas de arrastre

ALTERNATIVA 3.1: EXTRACCIÓN TOTAL DE MESITILENO Y POSTERIOR SEPARACIÓN MEDIANTE DOS TORRES

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	C2	35	32	7,83	1	1,98	32,91
	ACCOL	13	9	2,78	0,5	0,45	13,41
	BUTCOL	9	1		1	0,45	10,97
	WATCOL	2	1		1	0,45	4,87
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H3	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,27	0,02	6,09	1	1
	H4	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,01	0,02	6,09	1	1
COLUMNA DE EXTRACCIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)		
	C1	20	1	0,60	20,34		
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,91	3,65			

Tabla 10. Equipos. Extracción total de mesitileno-Posterior separación con dos torres.

ALTERNATIVA 3.2:EXTRACCIÓN TOTAL DE MESITILENO Y POSTERIOR SEPARACIÓN MEDIANTE UNA TORRE

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	C2	35	32	7,83	1	1,98	32,91
	ACCOL	13	9	2,78	0,5	0,45	13,41
	BUTCOL	10	1		1	0,45	11,58
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H3	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,27	0,02	6,09	1	1
COLUMNA DE EXTRACCIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)		
	C1	20	1	0,60	20,34		
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,914	3,65			

Tabla 11. Equipos. Extracción total de mesitileno-Posterior separación con una torre.

ALTERNATIVA 3.3: EXTRACCIÓN PARCIAL DE MESITILENO Y POSTERIOR SEPARACIÓN MEDIANTE SECUENCIA DIRECTA

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	C2	15	12	4	1	1,82	15,24
	ACCOL	13	7	8	0,5	0,45	13,41
	C3	30	3	5,01	1	0,45	28,04
	BUTCOL	11	1		1	0,45	12,80
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H3	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,11	0,02	6,09	1	1
COLUMNA DE EXTRACCIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)		
	C1	20	1	0,60	20,34		
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,933	0,91	3,65			

Tabla 12. Equipos. Extracción parcial de mesitileno-Posterior separación mediante secuencia directa.

ALTERNATIVA 3.4: EXTRACCIÓN PARCIAL DE MESITILENO Y POSTERIOR SEPARACIÓN MEDIANTE SECUENCIA INDIRECTA

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	C2	15	12	4	1	1,82	15,24
	ACCOL	13	7	8	0,5	0,45	13,41
	C3	30	20	12,82	1	0,76	28,04
	BUTCOL	10	1		1	0,45	11,58
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H3	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	0,26	0,02	6,09	1	1
COLUMNA DE EXTRACCIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)		
	C1	20	1	0,60	20,34		
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,91	3,65			

Tabla 13. Equipos. Extracción parcial de mesitileno-Posterior separación mediante secuencia indirecta.

ALTERNATIVA 4: SEPARACIÓN DE BUTANOL SIN RECUPERACIÓN DE ACETONA

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	Nº PLATOS	PLATO DE ALIMENTACIÓN	RELACIÓN DE REFLUJO (L/D)	P. DE OPERACIÓN (atm)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)
	WATERC1	12	4	6	1	1,06	12,8
	BUTCOL	12	1		1	0,45	13,41
CONDESADOR	TAGNAME	TIPO	AREA DE TRANSFERENCIA DE CALOR (sqm)	DIÁMETRO EXTERIOR TUBO (m)	LONGITUD TUBO(m)	Nº DE PASOS POR TUBO	Nº DE PASOS POR CRCASA
	H1	TEMA SHELL ANDTUBE EXCHANGER	1,764	0,0254	6,096	1	1
DECANTADOR	TAGNAME	VOLUMEN DE LÍQUIDO(L)	DIÁMETRO (m)	ALTURA (m)			
	DEC	2401,93	0,91	3,65			
	DEC 2	2401,93	0,91	3,65			

Tabla 14. Equipos. Separación de Butanol sin recuperación de acetona.

6.3. REQUERIMIENTO ENERGÉTICO DE LAS ALTERNATIVAS DE SEPARACIÓN

En este apartado, se reflejan las necesidades energéticas de cada equipo, para cada una de las alternativas. Al final se hará una comparación de todas ellas.

ALTERNATIVA 1: DESTILACIÓN CONVENCIONAL

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	WATERC1	396,7	1258,6	1655,4
	C2	59,0	55,4	114,4
	WATERC2		12,4	12,4
	BUTANOLC		22,1	22,1
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR (kW)	TOTAL (kW)	1804,3
	H1	18,9	18,9	
	H2	9,7	9,7	28,7
				1832,9

Tabla 15. Necesidades energéticas. Destilación convencional

ALTERNATIVA 2: GAS DE ARRASTRE

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	ACECOL	6,2	61,5	67,6
	WAT-COL		68,4	68,4
	BUTCOL		19,4	19,4
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR RETIRADO (kW)		155,4
	F1	523,0		
	H2	16,6		
	H3	46,6		
	F2	0,4		586,6
I. DE CALOR	TAGNAME	CALOR APORTADO (kW)		
	H1	868,8		868,8
BOMBA	TAGNAME	ENERGÍA (kW)		
	B1	2,2		2,2
COMPRESOR	TAGNAME	ENERGÍA (kW)		
	C1	14,3		14,3
				1627,3

Tabla 16. Necesidades energéticas. Gas de arrastre

**ALTERNATIVA 3.1: EXTRACCIÓN TOTAL DE MESITILENO-POSTERIOR SEARACIÓN
MEDIANTE DOS TORRES**

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	C2	231,6	1814,6	2046,2
	ACCOL	26,8	28,4	55,2
	BUTCOL		16,8	16,8
	WATCOL		1,6	1,6
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR RETIRADO (kW)		2118,2
	H3	14,2		
	H4	1,4		15,5
				2133,7

Tabla 17. Necesidades energéticas. Extracción total de mesitileno- Posterior separación mediante dos torres

**ALTERNATIVA 3.2: EXTRACCIÓN TOTAL DE MESITILENO-POSTERIOR SEARACIÓN
MEDIANTE UNA TORRE**

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	C2	231,6	1814,6	2046,2
	ACCOL	26,8	28,4	55,2
	BUTCOL		16,0	16,0
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR RETIRADO (kW)		2117,4
	H3	14,2		14,2
				2131,6

Tabla 18. Necesidades energéticas. Extracción total de mesitileno- Posterior separación mediante una torre

**ALTERNATIVA 3.3: EXTRACCIÓN PARCIAL DE MESITILENO. POSTERIOR SEPARACIÓN
MEDIANTE SECUENCIA DIRECTA**

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	C2	132,8	1716,9	1849,7
	ACCOL	27,0	28,5	55,5
	C3	45,4	47,4	92,8
	BUTCOL		7,0	7,0
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR RETIRADO (kW)		1998,1
	H3	6,3		6,3
				2004,4

Tabla 19. Necesidades energéticas. Extracción parcial de mesitileno- Posterior separación mediante secuencia directa

**ALTERNATIVA 3.4: EXTRACCIÓN PARCIAL DE MESITILENO. POSTERIOR SEPARACIÓN MEDIANTE
SECUENCIA INDIRECTA**

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	C2	132,8	1716,9	1849,7
	ACCOL	27,0	28,5	55,5
	C3	374,0	376,0	750,0
	BUTCOL		14,5	14,5
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR RETIRADO (kW)		2655,2
	H3	13,7		13,7
				2668,9

Tabla 20. Necesidades energéticas. Extracción parcial de mesitileno- Posterior separación mediante secuencia indirecta

ALTERNATIVA 4: SEPARACIÓN DE BUTANOL SIN RECUPERCIÓN DE ACETONA

TORRE DE DESTILACIÓN	TAGNAME	CALOR DEL CONDENSADOR (kW)	CALOR DEL EBULLIDOR (kW)	TOTAL (kW)
	WATERC1	483,9	1346,7	1830,7
	BUTCOL		72,2	72,2
CONDENSADOR	TAGNAME	CALOR (kW)		1902,9
	H2	72,0		72,0
				1974,9

Tabla 21. Necesidades energéticas. Separación de Butanol sin recuperación de acetona.

6.3.1. Resumen de necesidades energéticas de las alternativas simuladas

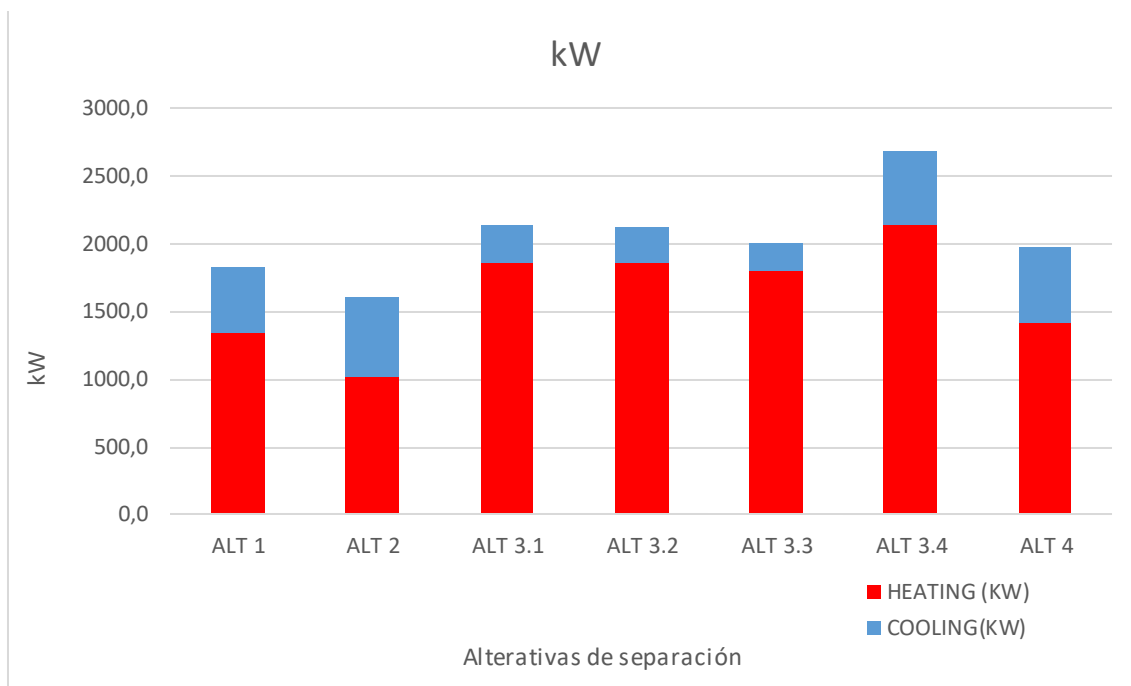
En la tabla 22 se muestra un resumen de las necesidades energéticas totales de cada alternativa. También se ha calculado la energía por unidad de butanol recuperado para establecer una comparación más realista.

	kW	kg/h BUTANOL	kJ/kg BUTANOL
DESTILACIÓN CONVENCIONAL	1832,9	80,4	82025,5
GAS DE ARRASTRE	1627,3	75,2	77888,0
HÍBRIDA 2 TORRES	2133,7	79,2	97030,7
HÍBRIDA 1 TORRE	2131,6	79,0	97127,8
HÍBRIDA DIRECTA	2004,4	74,3	97144,9
HÍBRIDA INDIRECTA	2668,9	78,7	122067,5
SEP. DE BUTANOL SIN ACETONA	1974,9	57,9	122784,7

Tabla 22. Comparación de las necesidades energéticas totales entre las alternativas.

Si se compara la tabla 22, con la tabla 3, aquella donde se resumen los gastos energéticos de técnicas de separación in-situ, se ve una analogía entre las destilaciones convencionales. Para una separación ABE convencional se requieren 30000 kcal/kg, mientras que para el caso en el que no existe etanol, se precisan 82025.5 kJ/kg que equivalen a 19604,5 kJ/kg. Como es lógico el gasto energético para separar un caldo de fermentación sin etanol es considerablemente menor.

En la gráfica 1 se representa la energía total (kW), dividida en función si es para calefacción o refrigeración. En la gráfica 2 se recoge la energía por unidad de butanol (kJ/kg). Ambas gráficas están evaluadas para cada una de las alternativas de separación.



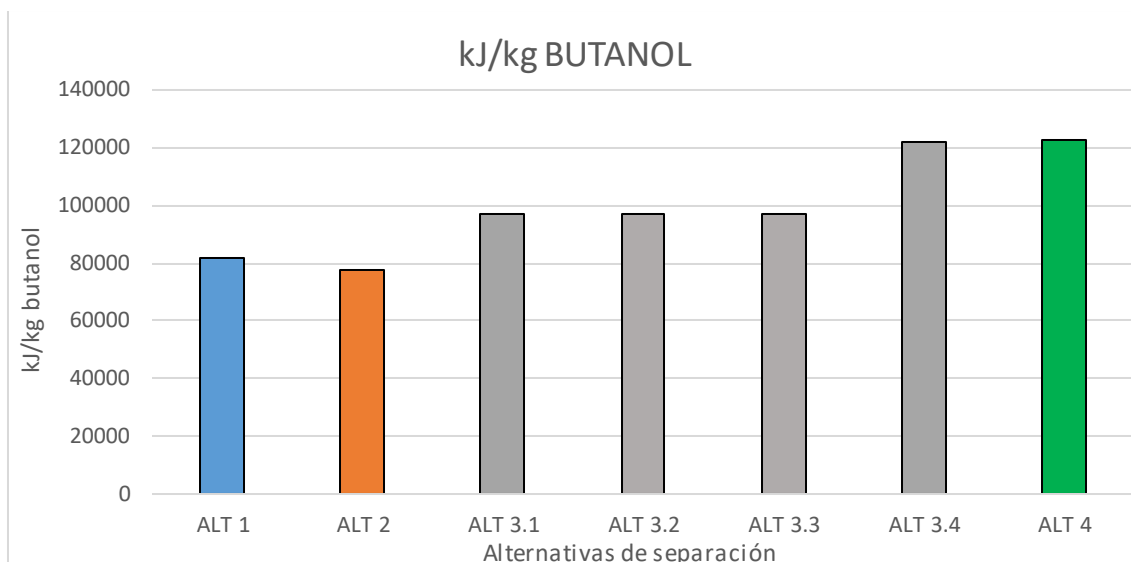
Gráfica 1. Resumen de la energía total para cada alternativa

Se observa como la alternativa que menos energía requiere es la de gas de arrastre.

Las que se basan en la destilación híbrida, arrojan consumos energéticos bastantes parecidos, con lo que para elegir la más óptima habrá que estudiar el balance económico.

La mayor parte de energía involucrada en cada proceso proviene del aporte de calor a las corrientes. La alternativa 2, la de gas de arrastre, posee el reparto más equitativo entre refrigeración y calefacción, es por ello que será la más integrable energéticamente.

Pese a que, en las técnicas de separación integradas con la fermentación, la extracción líquido-líquido requiere muy poca energía, cuando se separa externamente el caldo de fermentación, el hecho de extraer el solvente mediante una torre de destilación, aumenta considerablemente los gastos energéticos. Si se analizan las tablas 18-21, la energía involucrada en la torre C2, supone entre un 65% y 92%, dependiendo de la configuración, de la energía total. Para optimizar esta técnica se tendrán que buscar en un futuro nuevos solventes cuya separación sea mucho menos costosa.



Gráfica 2. Resumen de la energía total por unidad de butanol recuperado

La alternativa en la que solo se separa butanol, aumenta en gran medida la cantidad de energía requerida por unidad de butanol, ya que su porcentaje de recuperación es bastante bajo.

Se puede concluir, que energéticamente, la alternativa más rentable es la de gas de arrastre. A continuación, le sigue la destilación convencional. Las configuraciones basadas en la destilación híbrida, requieren una gran cantidad de energía para separar el mesitileno del sistema. Por último, el bajo porcentaje de recuperación de butanol, en la alternativa 4, hace que energéticamente sea de las menos óptimas.

Habrá que realizar un estudio económico para concretar la alternativa más eficiente.

6.4. BALANCE ECONÓMICO

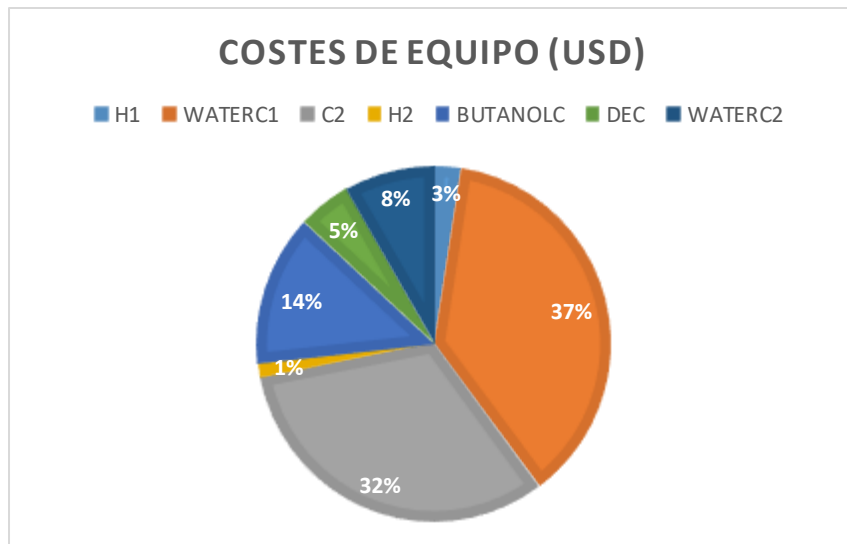
En este apartado se desarrollarán todos los costes de cada alternativa: costes de implementación, costes de equipos, costes de servicios generales, y costes de operación. Todos los datos han sido calculados usando ASPEN-PLUS®.

Al final del capítulo se hará una comparativa de las distintas alternativas de separación, estableciendo el precio al que habría que vender el producto para obtener una misma tasa interna de rentabilidad (TIR).

6.4.1. Alternativa 1: Destilación convencional

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
H1	7800
WATERC1	119100
C2	102400
H2	4200
BUTANOLC	43600
DEC	15400
WATERC2	26260
TOTAL	318760

Tabla 23. Costes de equipo. Destilación convencional.



Gráfica 3. Comparativa de costes de equipo. Destilación convencional

Total Project Capital Cost	USD	6251582
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	678782
Total Utilities Cost	USD/Y	379959,1
Total Operating Cost	USD/Y	1689118
Operating Charges	USD/Y	163397,3
Plant Overhead	USD/Y	339759,9
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1561898
G and A Cost	USD/Y	127219,8

Tabla 24. Costes de operación. Destilación convencional

TOTAL CAPITAL COST (USD)	6251582,4
Purchased Equipment	318760
Equipment Setting	15060
Piping	435719
Civil	99731,5
Steel	52647,9
Instrumentation	910714
Electrical	511003
Insulation	98280,8
Paint	35373
Other	3080000
Subcontracts	0
G and A Overheads	108195
Contract Fee	318804
Escalation	0
Contingencies	1080000

Total Project Cost	7064288,2
Adjusted Total Project Cost	6251582,4

Tabla 25. Costes de implementación. Destilación convencional

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	WATERC1	30763,43	-396,7	0,97
	C2	4578,32	-59,0	0,14
	H1	1470,52	-18,9	0,04
	H2	754,92	-9,7	0,02
Steam @100PSI	WATERC1	2191,72	1258,6	39,33
	C2	96,43	55,3	1,73
	WATERC2	21,64	12,4	0,38
	BUTANOL	38,46	22,0	0,69
Electricity	WATER C1		0,3	0,02
	C2		0,2	0,01

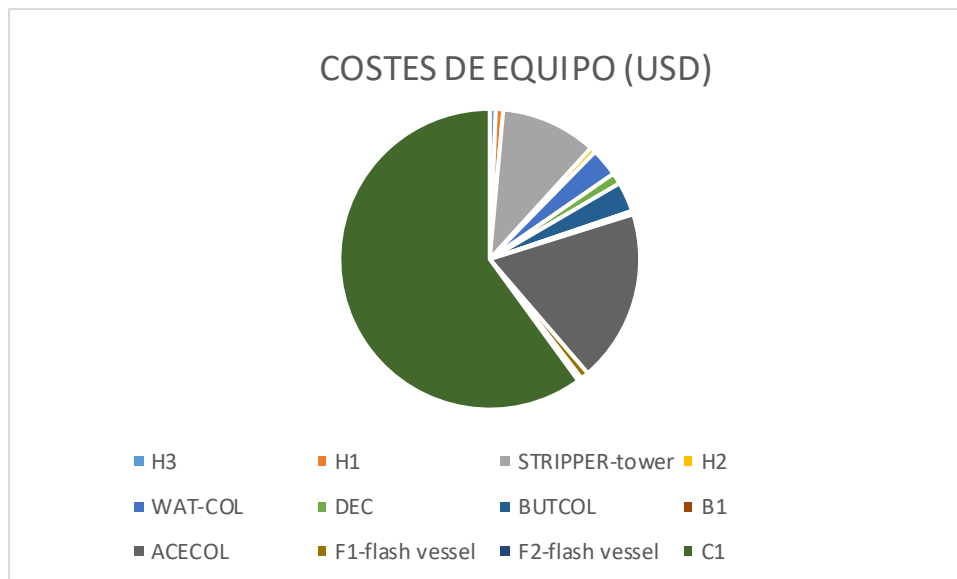
TOTAL	43,37
USD/YEAR	379959,06

Tabla 26. Costes de servicios generales. Destilación convencional

6.4.2. Alternativa 2: Gas de arrastre

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
H3	8300
H1	10100
STRIPPER	131200
H2	7800
WAT-COL	38400
DEC	15400
BUTCOL	40800
B1	4900
ACECOL	236000
F1-flash	10900
F2-flash	5500
C1	764400
TOTAL	1273700

Tabla 27. Costes de equipo. Gas de arrastre



Gráfica 4. Comparativa de costes de equipo. Gas de arrastre

Total Project Capital Cost	USD	7925486
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	868070,7
Total Utilities Cost	USD/Y	285217,6
Total Operating Cost	USD/Y	1938569
Operating Charges	USD/Y	200645,2
Plant Overhead	USD/Y	433086,6
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1787020
G and A Cost	USD/Y	151549

Tabla 28. Costes de operación. Gas de arrastre.

TOTAL CAPITAL COST (USD)	7925485,5
Purchased Equipment	1273700
Equipment Setting	30316,6
Piping	474753
Civil	111462
Steel	59865,1
Instrumentation	960271
Electrical	530707
Insulation	108941
Paint	33958
Other	3460000
Subcontracts	0
G and A Overheads	152189
Contract Fee	369636
Escalation	0
Contingencies	1390000

Total Project Cost	8955798,7
Adjusted Total Project Cost	7925485,58

Tabla 29. Costes de implementación. Gas de arrastre.

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	H2	1288,60	-16,6	0,04
	H3	3615,66	-46,6	0,11
Refrigerant - Freon 12	F1	2951,82	-523,	0,55
	F2	10,98	-0,3	0,00
	ACECOL	135,19	-6,1	0,02
Steam @100PSI	BUTCOL	33,77	19,3	0,60
	WAT-COL	119,13	68,4	2,13
	ACECOL	107,02	61,4	1,92
	H1	1512,98	868,8	27,15
Electricity	ACECOL		0,1	0,01
	B1		2,1	0,28
	C1		14,3	1,15

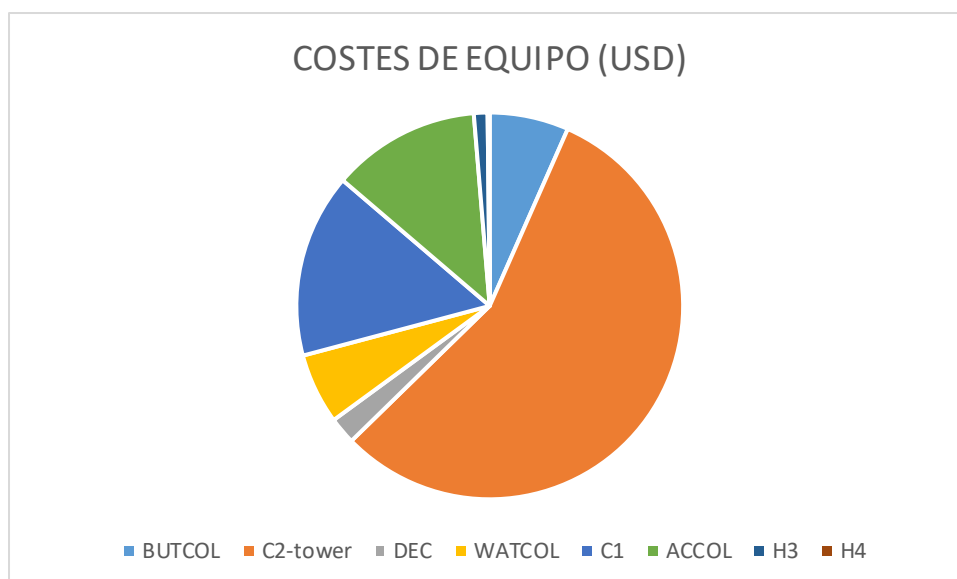
TOTAL	32,55
USD/YEAR	285217,63

Tabla 30. Costes de servicios generales. Gas de arrastre

6.4.3. Alternativa 3.1: Destilación híbrida. Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 2 torres de destilación.

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
BUTCOL	45100
C2-tower	382300
DEC	15400
WATCOL	40300
C1	104960
ACCOL	84700
H3	7800
H4	1200
TOTAL	681760

Tabla 31. Costes de equipo. Destilación híbrida (I)



Gráfica 5. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (I)

Total Project Capital Cost	USD	6774925
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	713150
Total Utilities Cost	USD/Y	516876,5
Total Operating Cost	USD/Y	1894323
Operating Charges	USD/Y	166052,1
Plant Overhead	USD/Y	354708,1
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1750787
G and A Cost	USD/Y	143536,6

Tabla 32. Costes de operación. Destilación híbrida (I)

TOTAL CAPITAL COST (USD)	6774925,31
Purchased Equipment	681760
Equipment Setting	24603,8
Piping	459692
Civil	112801
Steel	65460,9
Instrumentation	909856
Electrical	511950
Insulation	120265
Paint	38739,9
Other	3130000
Subcontracts	0
G and A Overheads	120360
Contract Fee	330177
Escalation	0
Contingencies	1150000

Total Project Cost	7655665,6
Adjusted Total Project Cost	6774925,31

Tabla 33. Costes de implementación. Destilación híbrida (I)

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	H4	106,12	-1,3	0,01
	H3	1099,10	-14,1	0,03
	ACCOL	2076,92	-26,7	0,06
	C2	17816,92	-231,6	0,56
Steam @100PSI	ACCOL	49,52	28,4	0,88
	WATCOL	2,77	1,5	0,05
	C2	3167,21	1818,9	56,83
	BUTCOL	29,19	16,7	0,52
Electricity	C2		0,3	0,02
	ACCOL		0,1	0,01

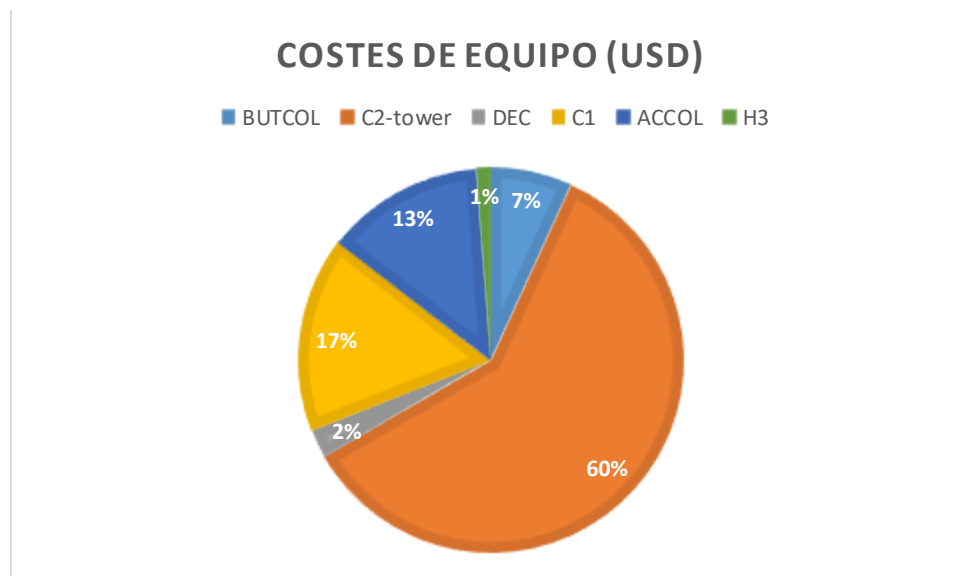
TOTAL	59,004
USD/YEAR	516876,527

Tabla 34. Costes de servicios generales. Destilación híbrida(I)

6.4.4. Alternativa 3.2: Destilación híbrida. Extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 1 torre de destilación.

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
BUTCOL	43600
C2	382300
DEC	15400
C1	104960
ACCOL	84700
H3	7800
TOTAL	638760

Tabla 35. Costes de equipo. Destilación híbrida (II)



Gráfica 6. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (II)

Total Project Capital Cost	USD	6279296,5
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	710327,65
Total Utilities Cost	USD/Y	516183,31
Total Operating Cost	USD/Y	1883869,4
Operating Charges	USD/Y	163523,35
Plant Overhead	USD/Y	350798,68
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1740833
G and A Cost	USD/Y	143036,37

Tabla 36. Costes de operación. Destilación híbrida (II)

TOTAL CAPITAL COST (USD)	6279296,46
Purchased Equipment	638760
Equipment Setting	23798,6
Piping	425510
Civil	108014
Steel	58898
Instrumentation	831454
Electrical	510000
Insulation	111935
Paint	36026,4
Other	2860000
Subcontracts	0
G and A Overheads	113039
Contract Fee	308170
Escalation	0
Contingencies	1070000

Total Project Cost	7095605
Adjusted Total Project Cost	6279296,46

Tabla 37. Costes de implementación. Destilación híbrida (II)

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	H3	1038,46	-14,1	0,03
	ACCOL	2076,92	-26,7	0,06
	C2	17816,92	-231,6	0,56
Steam @100PSI	ACCOL	49,52	28,4	0,88
	C2	3167,21	1818,9	56,83
	BUTCOL	27,86	16,7	0,50
Electricity	C2		0,3	0,02
	ACCOL		0,1	0,01

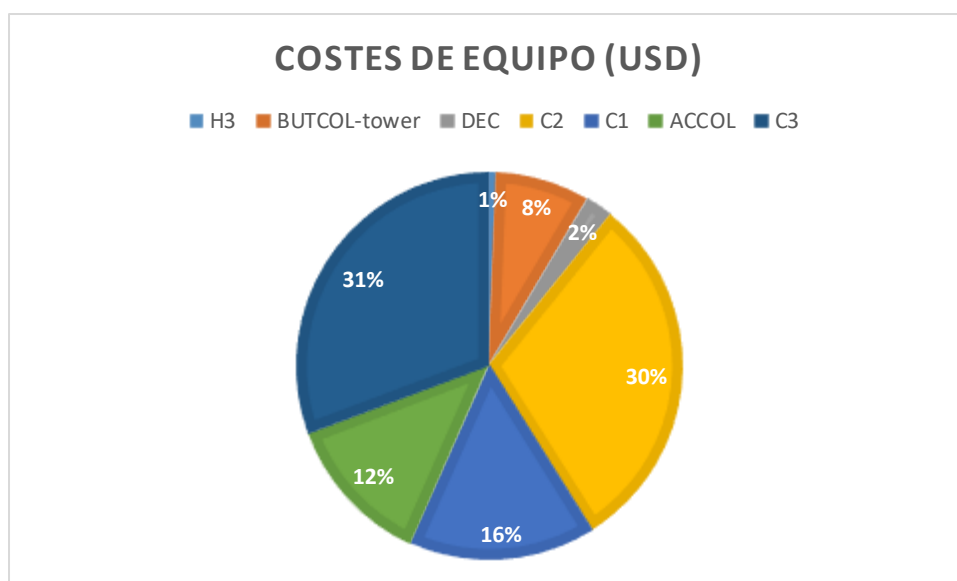
TOTAL	58,92
USD/YEAR	516183,31

Tabla 38. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (II)

6.4.5. Alternativa 3.3: Destilación híbrida. Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia directa.

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
H3	4200
BUTCOL	52700
DEC	15400
C2	203500
C1	104960
ACCOL	84700
C3	206100
TOTAL	671560

Tabla 39. Costes de equipo. Destilación híbrida (III)



Gráfica 7. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (III)

Total Project Capital Cost	USD	7058460,5
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	705846,05
Total Utilities Cost	USD/Y	497508,62
Total Operating Cost	USD/Y	1861137,8
Operating Charges	USD/Y	164532,88
Plant Overhead	USD/Y	352923,03
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1720810,6
G and A Cost	USD/Y	140327,25

Tabla 40. Costes de operación. Destilación híbrida (III)

TOTAL CAPITAL COST (USD)	7058460,53
Purchased Equipment	671560
Equipment Setting	24814,4
Piping	504829
Civil	115791
Steel	65601,5
Instrumentation	959268
Electrical	516154
Insulation	119724
Paint	40904,5
Other	3290000
Subcontracts	0
G and A Overheads	124855
Contract Fee	342559
Escalation	0
Contingencies	1200000

Total Project Cost	7976060,4
Adjusted Total Project Cost	7058460,53

Tabla 41. Costes de implementación. Destilación híbrida (III)

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	C3	3520,91	-45,4	0,11
	ACCOL	2092,08	-26,9	0,06
	C2	10297,43	-132,7	0,32
	H3	492,70	-6,3	0,01
Steam @100PSI	C3	82,56	47,4	1,48
	ACCOL	49,68	28,5	0,89
	C2	2989,82	1716,9	53,65
	BUTCOL	12,10	6,9	0,21
Electricity	C2		0,1	0,01
	ACCOL		0,1	0,01
	C3		0,1	0,01

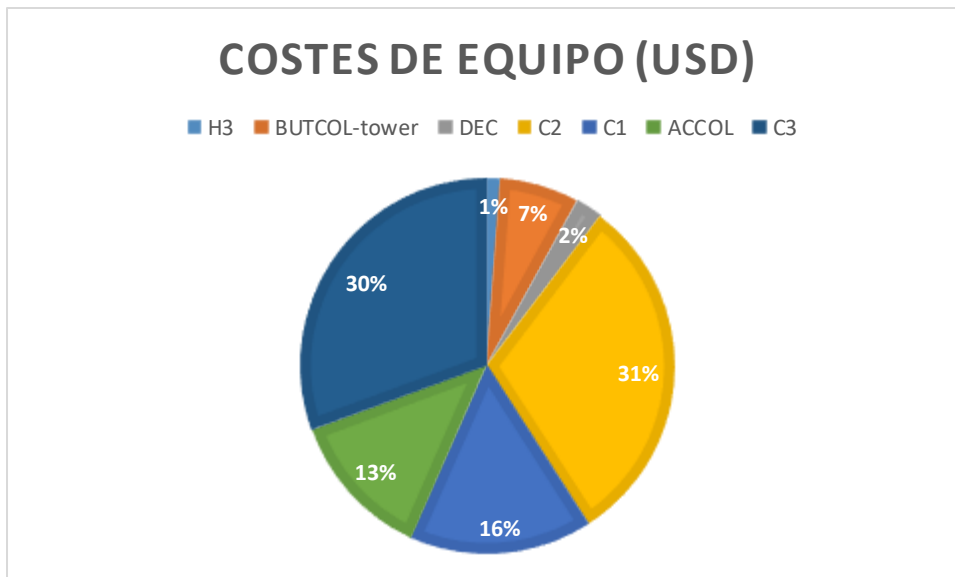
TOTAL	56,79
USD/YEAR	497508,61

Tabla 42. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (III)

6.4.6. Alternativa 3.4: Destilación híbrida. Extracción parcial de mesitileno y posterior separación mediante secuencia indirecta.

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
H3	7800
BUTCOL	45100
DEC	15400
C2	203500
C1	104960
ACCOL	84700
C3	203200
TOTAL	664660

Tabla 43. Costes de equipo. Destilación híbrida (IV)



Gráfica 8. Comparativa de costes de equipo. Destilación híbrida (IV)

Total Project Capital Cost	USD	7457217,3
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	703033
Total Utilities Cost	USD/Y	604732,41
Total Operating Cost	USD/Y	1972623,5
Operating Charges	USD/Y	164255,89
Plant Overhead	USD/Y	351755,53
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1823776,8
G and A Cost	USD/Y	148846,65

Tabla 44. Costes de operación. Destilación híbrida (IV)

TOTAL CAPITAL COST (USD)	7457217,26
Purchased Equipment	664660
Equipment Setting	23964,2
Piping	564011
Civil	130412
Steel	66955,2
Instrumentation	1010000
Electrical	517730
Insulation	141864
Paint	44965,1
Other	3490000
Subcontracts	0
G and A Overheads	131645
Contract Fee	360449
Escalation	0
Contingencies	1280000

Total Project Cost	8426655,5
Adjusted Total Project Cost	7457217,26

Tabla 45. Costes de implementación. Destilación híbrida (IV)

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	C3	29001,08	-45,4	0,91
	ACCOL	2095,87	-26,9	0,06
	C2	12362,98	-132,7	0,3
	H3	1061,20	-6,3	0,034
Steam @100PSI	C3	654,77	47,4	11,75
	ACCOL	49,73	28,5	0,89
	C2	3034,64	1716,9	54,45
	BUTCOL	25,19	6,9	0,45
Electricity	C2		0,2	0,01
	ACCOL		0,1	0,01
	C3		0,5	0,04

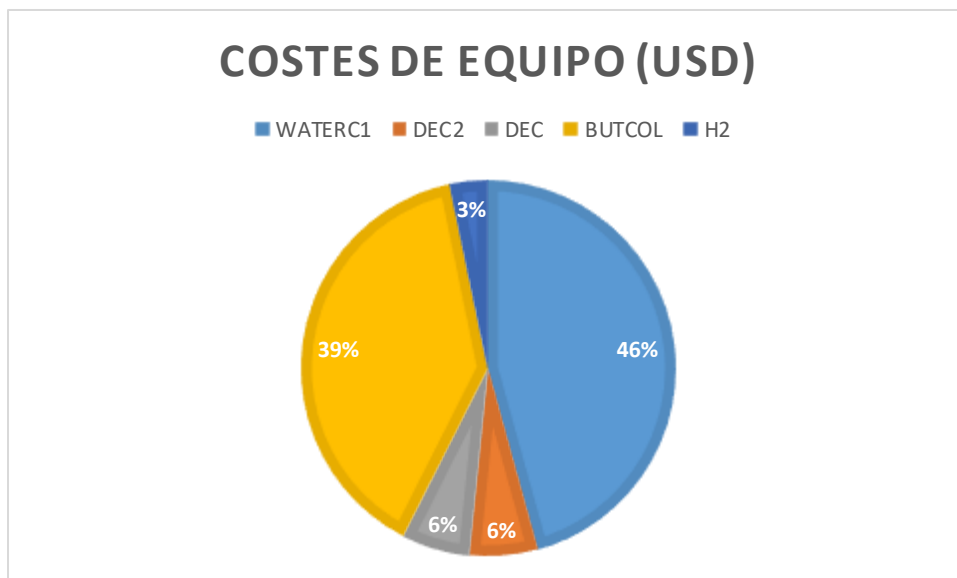
TOTAL	69,03
USD/YEAR	604732,41

Tabla 46. Costes de servicios generales. Destilación híbrida (IV)

6.4.7. Alternativa 4: Separación de butanol sin recuperación de acetona

EQUIPMENT	EQUIPMENT COST (USD)
WATERC1	119600
DEC2	15400
DEC	15400
BUTCOL	102700
H2	8500
TOTAL	261600

Tabla 47. Costes de equipo. Separación de butanol sin acetona



Gráfica 9. Comparativa de costes de equipo. Separación de butanol sin acetona

Total Project Capital Cost	USD	4680280,1
Total Operating Labor and Maintenance Cost	USD/Y	676341,05
Total Utilities Cost	USD/Y	400603,24
Total Operating Cost	USD/Y	1707093,5
Operating Charges	USD/Y	163360,56
Plant Overhead	USD/Y	337926,36
Subtotal Operating Cost	USD/Y	1578231,2
G and A Cost	USD/Y	128862,34

Tabla 48. Costes de equipo. Separación de butanol sin acetona

TOTAL CAPITAL COST (USD)	4680280,09
Purchased Equipment	261600
Equipment Setting	11200,7
Piping	312634
Civil	67899,3
Steel	42772,2
Instrumentation	656450
Electrical	502962
Insulation	79361,4
Paint	21426,1
Other	2190000
Subcontracts	0
G and A Overheads	83226,8
Contract Fee	248980
Escalation	0
Contingencies	810204

Total Project Cost	5288716,5
Adjusted Total Project Cost	4680280,09

Tabla 49. Costes de implementación. Separación de butanol sin acetona

FLUID	ITEM	RATE (kg/h)	kW	COST PER HOUR (USD/h)
Cooling water	H2	5552,35	-72,0	0,17
	WATERC1-cond	37524,79	-483,9	1,18
Steam @100PSI	BUTCOL-reb	1041961,96	72,2	2,23
	WATERC1-reb	19595213,39	1346,7	42,08
Electricity	WATERC1-reb		0,5	0,04
TOTAL				45,73
USD/YEAR				400603,23

Tabla 50. Costes de servicios generales. Separación de butanol sin acetona

6.4.8. Comparación del balance económico de las diferentes alternativas

En la tabla 51 se muestra un resumen de los costes y beneficios de cada una de las alternativas. Los costes que se indican son los de implementación, los costes de equipos, los costes de servicios generales y los de operación. Los beneficios por venta son producto de multiplicar el precio unitario de cada producto por su flujo.

El precio de venta del butanol y de acetona, para obtener en todas las alternativas un 5% de valor de TIR. Se ha establecido el tiempo de retorno en 15 años. En el anexo 2 aparecen las tablas descriptivas para el cálculo del TIR.

ALTERNATIVA	TOTAL CAPITAL COST (USD)	EQUIPMENT (USD)	UTILITIES (USD/Y)	OPERATION COST (USD/Y)	SALES (USD/Y)	PRECIO (USD/kg)	
						BUTANOL	ACETONA
DESTILACIÓN CONVENCIONAL	6,25E+06	3,19E+05	3,80E+05	1,69E+06	2,97E+06	3,45	3,05
GAS DE ARRASTRE	7,93E+06	1,27E+06	2,85E+05	1,94E+06	3,56E+06	4,54	4,02
HÍBRIDA 2 TORRES	6,77E+06	6,82E+05	5,17E+05	1,89E+06	3,28E+06	3,86	3,42
HÍBRIDA 1 TORRE	6,28E+06	6,39E+05	5,16E+05	1,88E+06	3,17E+06	3,74	3,31
HÍBRIDA DIRECTA	7,06E+06	6,72E+05	4,98E+05	1,86E+06	3,31E+06	4,10	3,62
HÍBRIDA INDIRECTA	7,46E+06	6,65E+05	6,05E+05	1,97E+06	3,50E+06	4,13	3,66
SEP. DE BUTANOL SIN ACETONA	4,68E+06	2,62E+05	4,01E+05	1,71E+06	2,66E+06	5,25	4,65

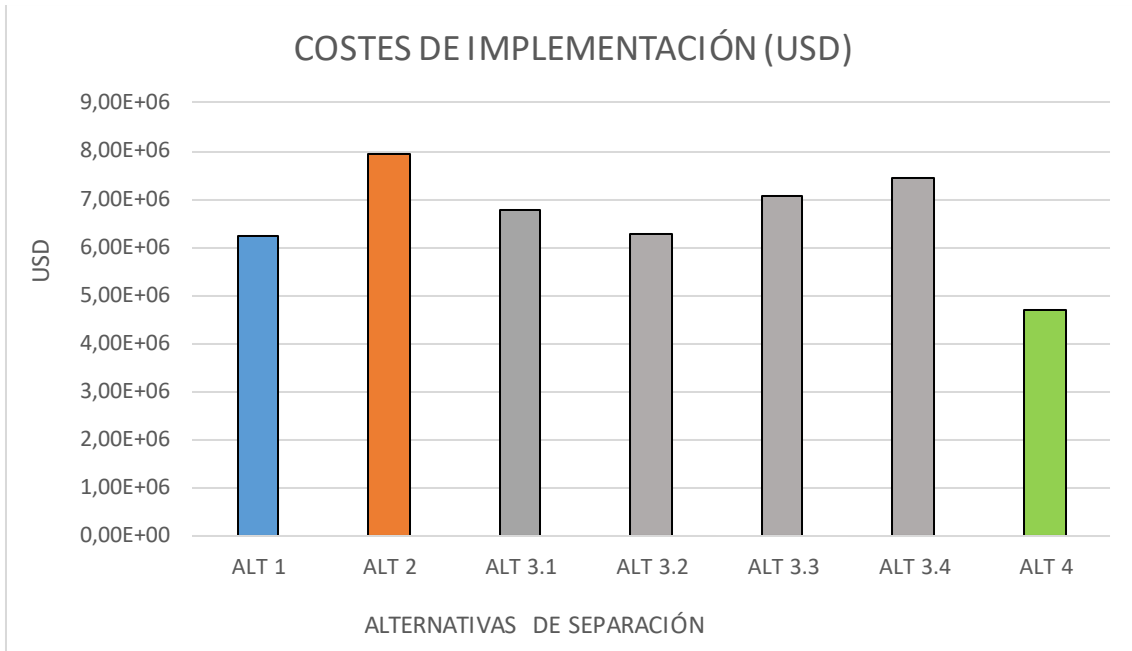
Tabla 51. Resumen de costes y beneficios de cada alternativa. Precio de productos para rentabilidad del proceso

La alternativa económica más rentable es la destilación convencional. A pesar, de cómo se ve en las gráficas 1 y 2, los requerimientos energéticos son mayores respecto a la de gas de arrastre, los costes de implementación y de operación son mucho menores.

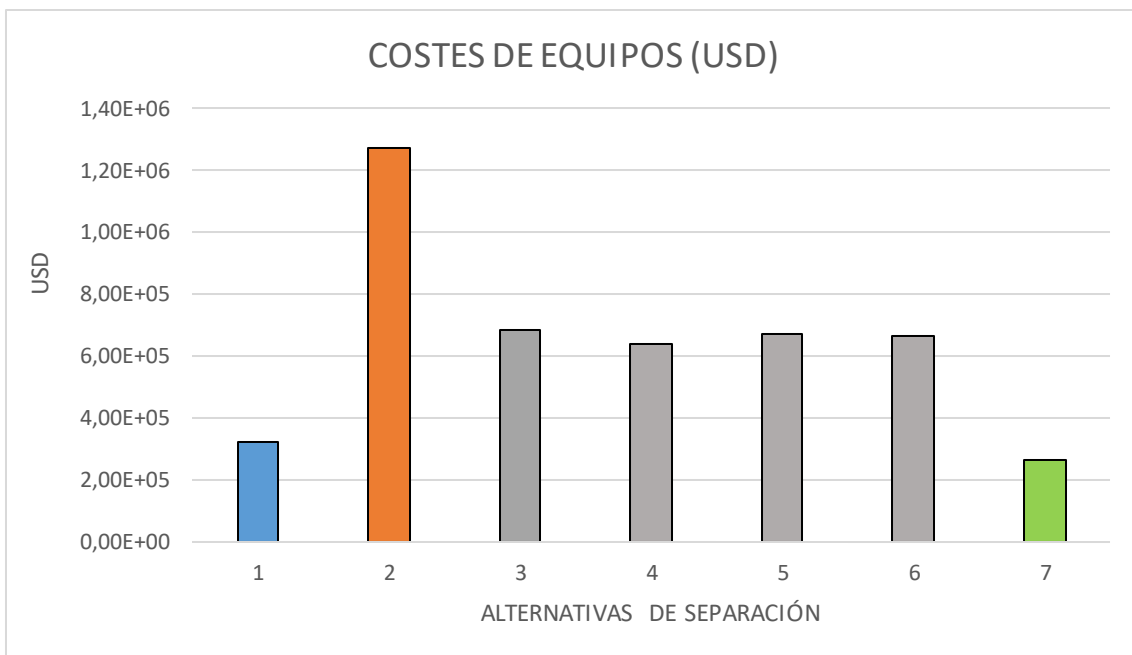
La alternativa de gas de arrastre requiere un gran número de equipos respecto al resto de alternativas, lo que provoca un aumento en el precio de venta para que salga rentable.

En cuanto a las 4 opciones de destilación híbrida, la más rentable es la destilación híbrida con extracción total de mesitileno y posterior separación mediante 1 torre.

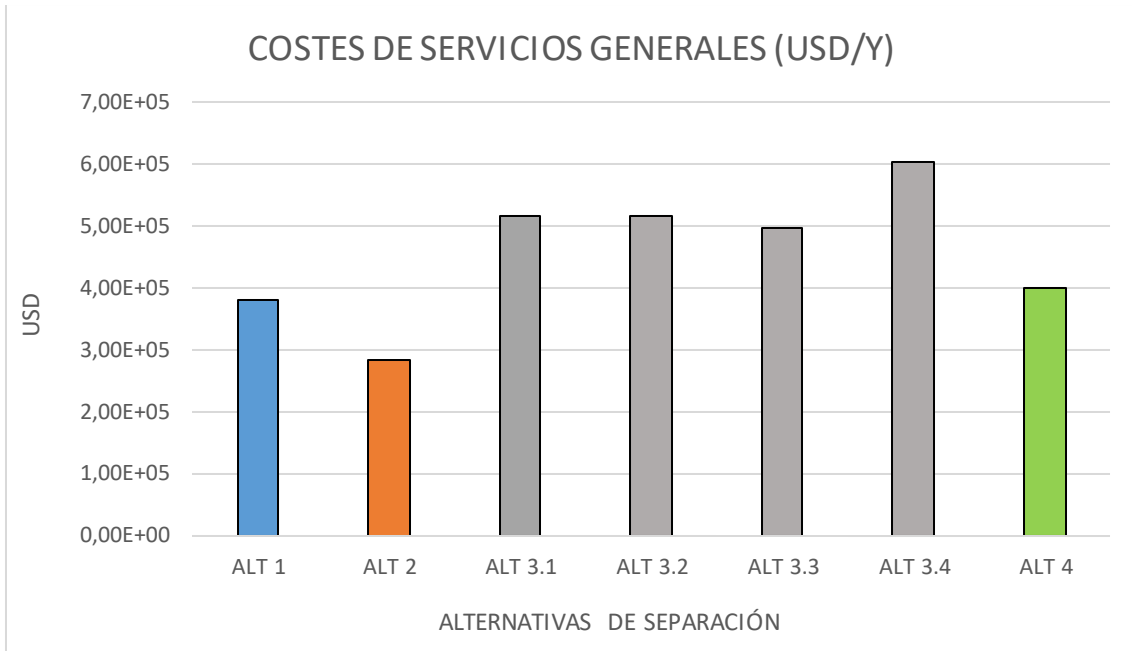
En las gráficas 10-16 se representan los resultados de la tabla 51 de una manera más visual.



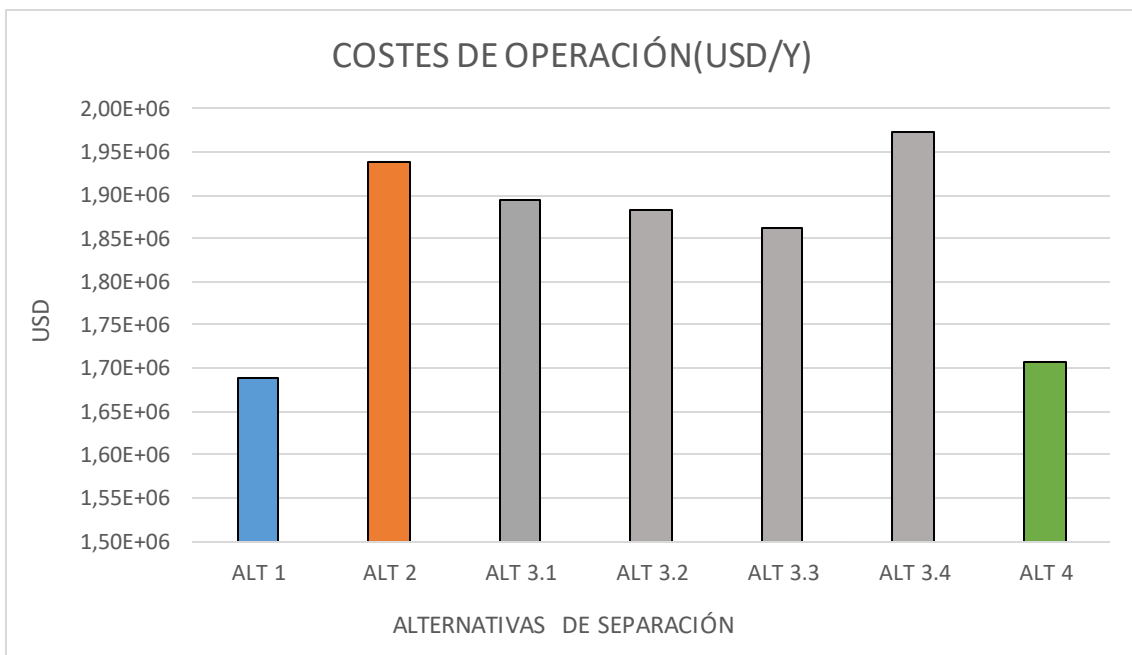
Gráfica 10. Comparativa de costes de implementación (USD)



Gráfica 11. Comparativa de costes de equipos (USD)

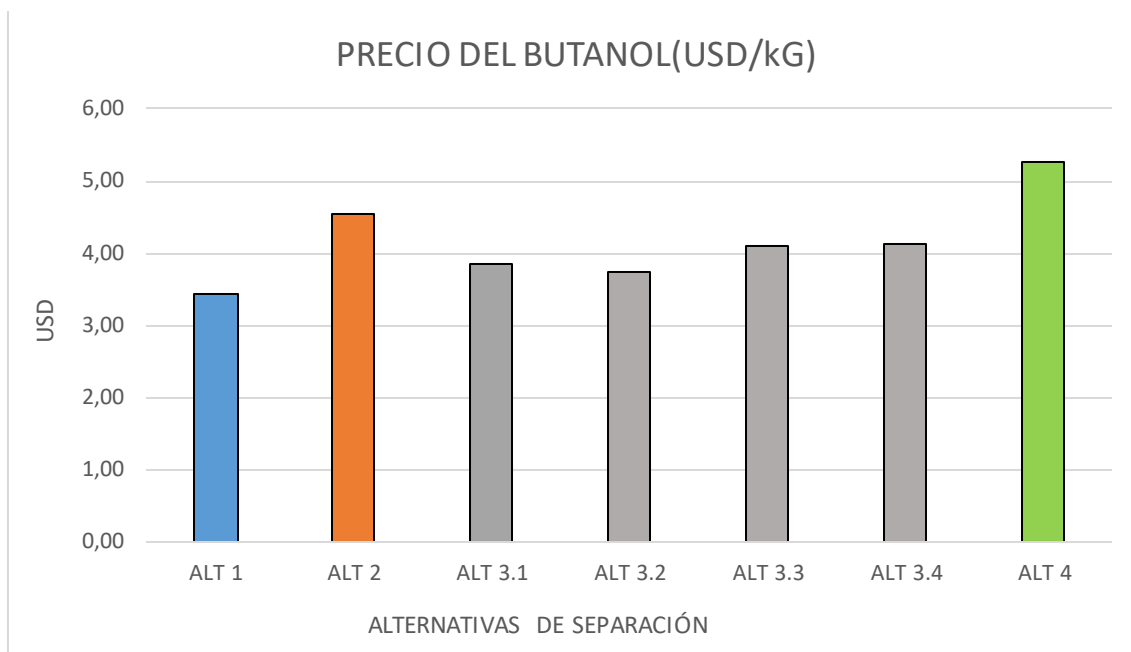


Gráfica 12. Comparativa de costes de servicios generales (USD/Y)



Gráfica 13. Comparativa de costes de operación (USD/Y)

Pese a que la alternativa de gas de arrastre, posee los gastos de servicios generales más bajos, gráfica 12, el hecho de requerir muchos más equipos hace incrementar el coste de equipos e implementación, y por consiguiente el coste de operación, evaluado anualmente, gráfica 13.



Gráfica 14. Comparativa de precio de butanol (USD/kg)

6.5. ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LA CONCENTRACIÓN DE BUTANOL EN EL BALANCE ECONÓMICO DEL PROCESO

Con el fin de poder optimizar el balance económico y poder sacar los productos a la venta con un precio menor, se han simulado las alternativas de destilación convencional, gas de arrastre, y destilación híbrida con posterior separación mediante una torre, modificando la composición de la alimentación. Existen cepas naturales y modificadas genéticamente que son capaces de producir concentraciones de butanol en el caldo de fermentación de hasta 18 g/L.

Se ha aumentado la concentración de butanol y acetona, manteniendo constante la relación másica entre ellos. Todos los parámetros referentes a los equipos permanecen constantes, para que se pueda realizar una comparación más exacta.

Todos los cálculos se han realizado de la misma manera a la previamente descrita.

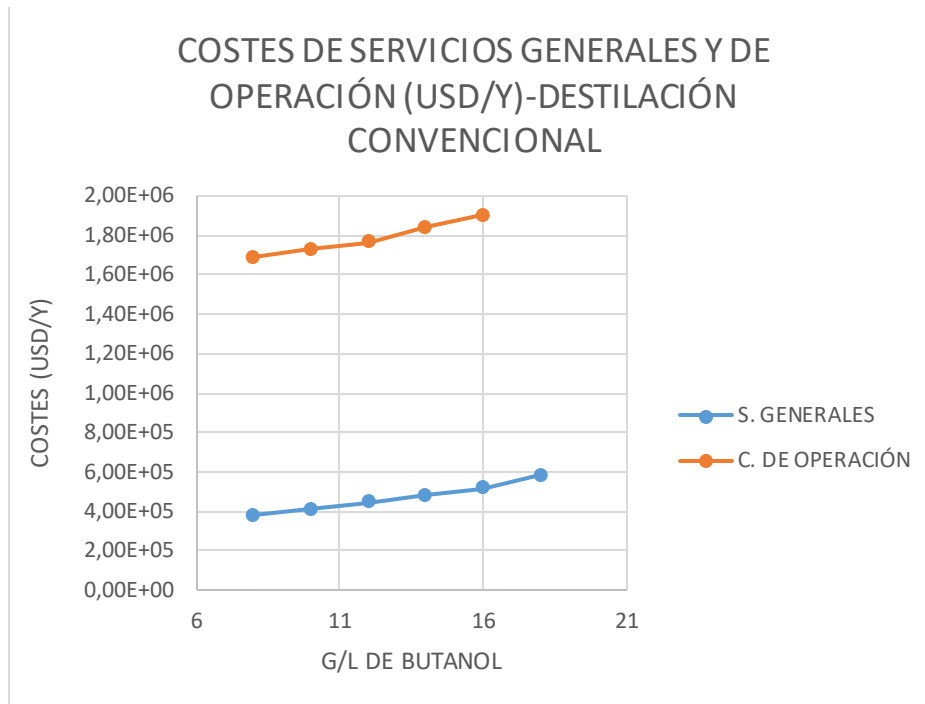
En la tabla 52 se visualizan los datos correspondientes a la energía requerida, los costes de operación y a los servicios generales. También se muestran los precios de cada producto para garantizar la misma rentabilidad.

Se ha aumentado la concentración de butanol en el caldo hasta 18 g/L ya que, a partir de valores mayores, hay que modificar numerosos parámetros en los equipos. En cualquier caso, no hay cepas de *Clostridium* que produzcan concentraciones de butanol superiores.

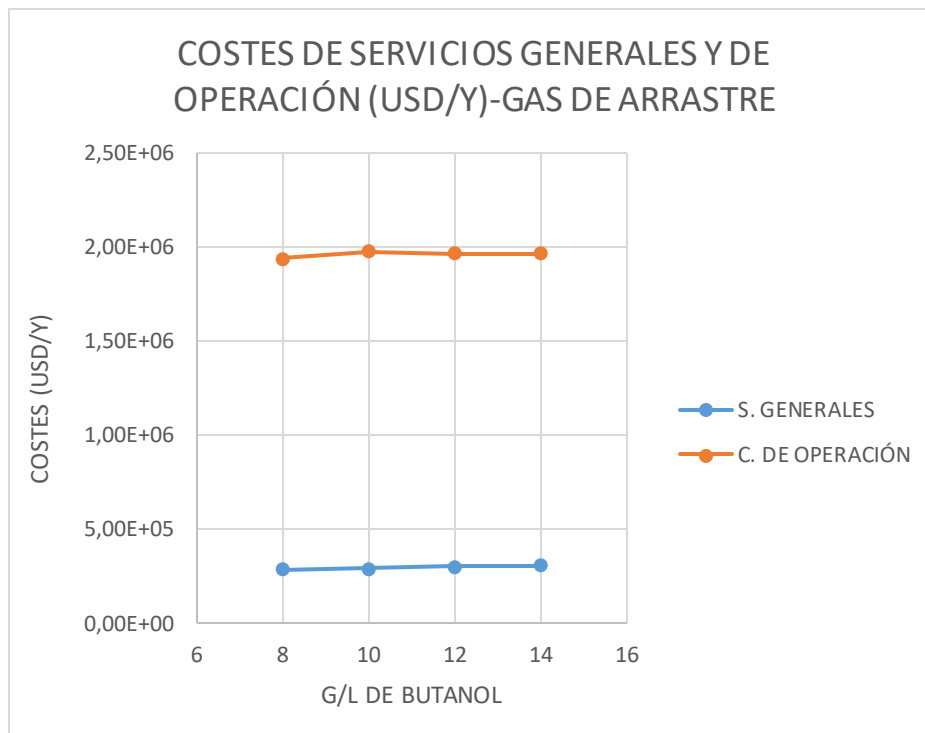
BUTANOL/ACETONA (g/L)	ALTERNATIVA	ENERGÍA (kW)	COSTES DE OPERACIÓN (USD/Y)	COSTES DE SERVICIOS GENERALES (USD/Y)	PRECIO BUTANOL (USD/kg)	PRECIO ACETONA (USD/kg)
8/2	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	1832,9	1,69E+06	3,80E+05	3,45	3,05
	GAS DE ARRASTRE	1627,3	1,94E+06	2,85E+05	4,54	4,02
	HÍBRIDA 1 TORRE	2131,5	1,88E+06	5,16E+05	3,74	3,31
10/2,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	2036,4	1,73E+06	4,10E+05	2,80	2,48
12/3	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	2283,5	1,77E+06	4,47E+05	2,36	2,09
	GAS DE ARRASTRE	1704,3	1,96E+06	2,93E+05	3,15	2,79
	HÍBRIDA 1 TORRE	2330,5	1,92E+06	5,52E+05	2,51	2,22
14/3,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	2526,0	1,80E+06	4,83E+05	2,05	1,81
16/4	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	2749,0	1,84E+06	5,16E+05	1,83	1,62
	GAS DE ARRASTRE	1786,6	1,97E+06	3,01E+05	2,28	2,02
	HÍBRIDA 1 TORRE	2587,7	1,96E+06	5,87E+05	1,90	1,68
18/4,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	3175,9	1,90E+06	5,80E+05	1,65	1,46
	GAS DE ARRASTRE	1814,9	1,98E+06	3,03E+05	2,15	1,90
	HÍBRIDA 1 TORRE	1622,1	1,98E+06	6,05E+05	1,70	1,50

Tabla 52. Resumen de costes y precios bajo distintas concentraciones en la alimentación

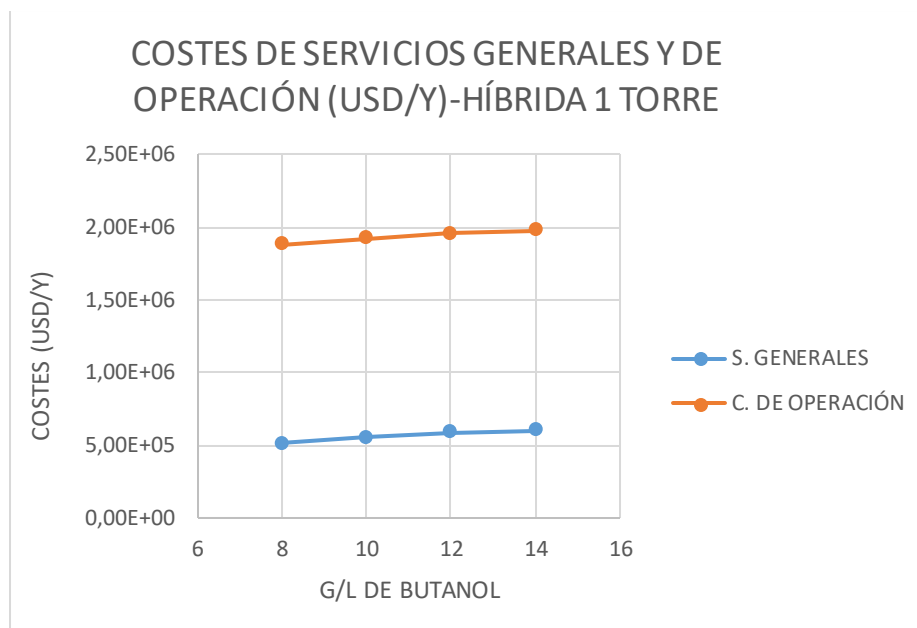
En las gráficas 15-18 se muestran los datos de la tabla 52 de una manera más visual, y permitirá un mejor análisis de los mismos.



Gráfica 15. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-destilación convencional

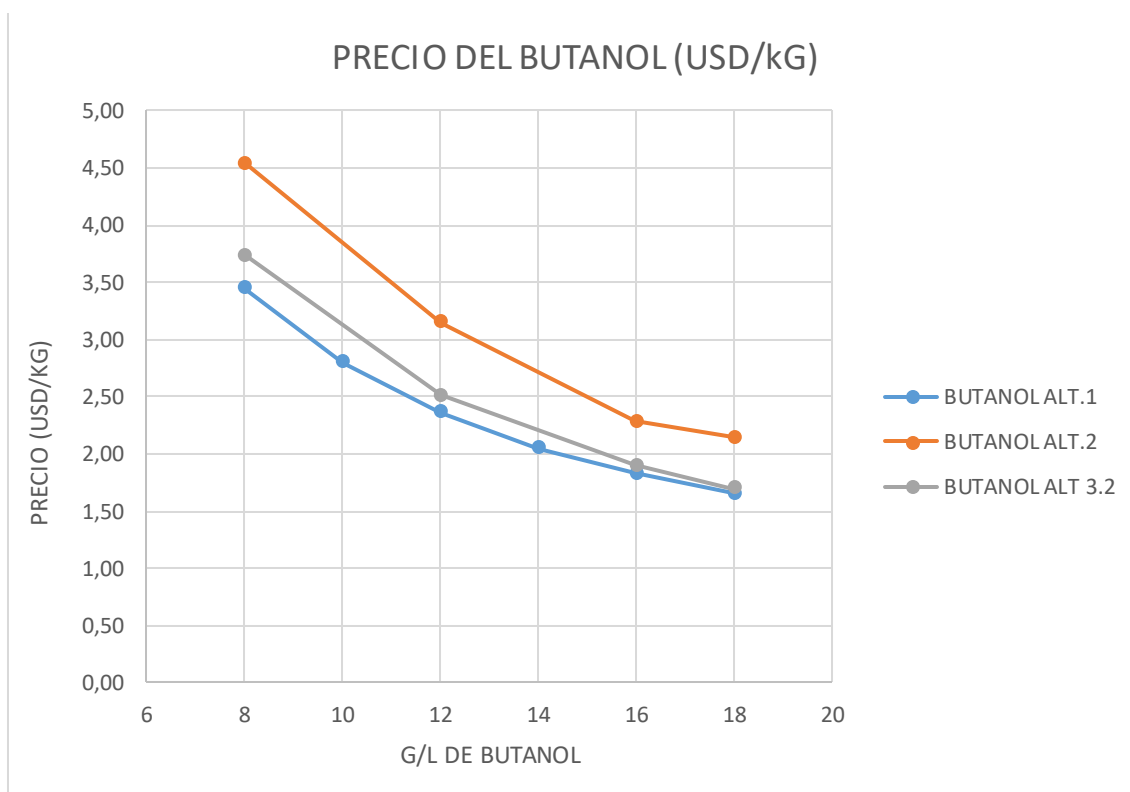


Gráfica 16. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-gas de arrastre



Gráfica 17. Costes de servicios generales y de operación (USD/Y)-híbrida 1 torre

Se aprecia claramente como a medida que se aumenta la concentración de butanol en el caldo de fermentación, los costes de los servicios generales y los costes de operación también aumentan. En parte, debido al mayor requerimiento energético.



Gráfica 18. Precio del butanol y (USD/kg)

Se observa claramente cómo, aunque los costes de operación y servicios generales aumentan, ya que se requiere más energía, el precio de venta disminuye ya que los flujos de butanol y acetona a la salida son mayores.

La alternativa más eficiente tras evaluar las nuevas concentraciones a la entrada, es la destilación convencional.

Futuras investigaciones tienen que ir por el intento de introducir en la fase de separación un caldo más concentrado. Una opción bastante viable podría ser una pervaporación al inicio para concentrar y posteriormente la destilación. Se rentabilizaría el proceso ya que la energía requerida para retirar el agua del sistema sería mucha menor.

6.6. EFLUENTES

En todas las alternativas se producen efluentes, los cuales están compuestos mayoritariamente por agua. Es interesante estudiar el uso de dichos efluentes. Uno de ellos podría ser su recirculación a las etapas iniciales del proceso de obtención de biobutanol, como es el pretratamiento.

Sin embargo, si las corrientes exceden un valor máximo de DQO (Demanda Química de Oxígeno), habrá que depurarla utilizando sistemas, tales como los digestores anaerobios, para eliminar tal carga orgánica.

Para la sección de separación se ha calculado la DQO de todos los efluentes y el biogás que se podría obtener de la depuración biológica de estas corrientes, lo que permitiría rentabilizar el proceso.

En la tabla 53 se muestran los datos de DQO y biogás generado para las distintas alternativas y bajo todas las condiciones de concentraciones iniciales simuladas. Solo se ha considerado el cálculo de biogás para aquellas corrientes que tengan una DQO superior a 1500 mg/L.

El cálculo de la DQO, aparece explicado en los anexos.

El biogás se calcula a partir de la DQO de cada corriente expresada en kg/h. Se supone un 90% de eliminación de materia orgánica, lo que permite calcular el flujo de metano producido sabiendo que se producen 0.35 Nm³ de CH₄ por cada kg de DQO eliminada.

Sabiendo que una corriente de biogás contiene entre el 60% y 70% de metano, siendo el resto mayoritariamente CO₂, se puede calcular el flujo total de biogás generado por cada efluente.

BUTANOL/ACETONA (g/L)	ALTERNATIVA	NOMBRE DE LA CORRIENTE		DQO(mg/L)		BIOGÁS (L/h)		
		CORRIENTE 1	CORRIENTE 2	CORRIENTE 1	CORRIENTE 2	CORRIENTE 1	CORRIENTE 2	TOTAL
8/2	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	3	-----	-----	-----
	GAS DE ARRASTRE	WATER	AGUA	1597	2382	7614	682	8296
	HÍBRIDA 2 TORRES	WATER	WATER2	55	9700	-----	55	55
	HÍBRIDA 1 TORRE	WATER	WATER-DE	55	191158	-----	1190	1190
	HÍBRIDA DIRECTA	WATER	WAT-DEC	54	131891	-----	756	756
	HÍBRIDA INDIRECTA	WATER	WAT-DEC	55	190211	-----	1175	1175
	SEPARACIÓN DE BUTANOL SIN ACETONA	REC	6	631	1907	-----	33	33
10/2,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	3	-----	-----	-----
12/3	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	2	-----	-----	-----
	GAS DE ARRASTRE	WATER	AGUA	2922	2382	13801	705	14507
	HÍBRIDA 1 TORRE	WATER	WATER-DE	78	189042	-----	1227	1227
14/3,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	2	-----	-----	-----
16/4	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	2	-----	-----	-----
	GAS DE ARRASTRE	WATER	AGUA	4725	2382	22095	734	22829
	HÍBRIDA 1 TORRE	WATER	WATER-DE	108	188245	-----	1265	1265
18/4,5	DESTILACIÓN CONVENCIONAL	WATER	WATER2	0	1	-----	-----	-----
	GAS DE ARRASTRE	WATER	AGUA	5754	2382	26824	737	27562
	HÍBRIDA 1 TORRE	WATER	WATER-DE	118	188203	-----	1290	1290

Tabla 53. DQO y biogás generado en cada simulación

7. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA

7. INTEGRACIÓN ENERGÉTICA

Con el objetivo de rentabilizar el proceso, se ha realizado la integración energética de la alternativa de gas de arrastre, ya que con el resto se ha comprobado que solo se puede conseguir un ahorro máximo del 3%-4%.

Se ha calculado para todas las condiciones iniciales simuladas para esta alternativa. Al final del capítulo se analizará el ahorro económico que supone la integración energética.

Mediante una aplicación web, aportada por Fidel Mato Chain, para la asignatura de Integración de Procesos, se puede calcular el ahorro de energía en términos de calefacción y enfriamiento, simplemente introduciendo la tabla de corrientes y la diferencia media de temperaturas (se ha tomado 10 °C). La aplicación también proporciona el punto donde se sitúa el pinch.

7.1. CONCENTRACIÓN DE 8 g/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN

En la tabla 54 se presentan las corrientes de la alternativa de gas de arrastre que son susceptibles a integrarse energéticamente.

TAGNAME	T1	T2	AH (kW)
FEED	25,19	98	868,8
F1	94,6	0	-523
ACEAIR	11,13	11,13	-6,1
F2	11,13	-27,39	-0,4
BUT+WAT	75,34	75,34	61,4
BUTANOL	117,63	117,63	19,3
AGUA	99,8	99,8	68,4
B-V	92,66	91,57	-16,6
A-V	92,62	91,54	-46,6

Tabla 54. Corrientes de integración energética. 8 g/L en la alimentación

Se podrá conseguir un ahorro energético del 38.47% y 66.07% en la calefacción y refrigeración respectivamente.

La figura 30 muestra el diagrama de corrientes colocados sobre el pinch de energía y la figura 31 representa la integración realizada.

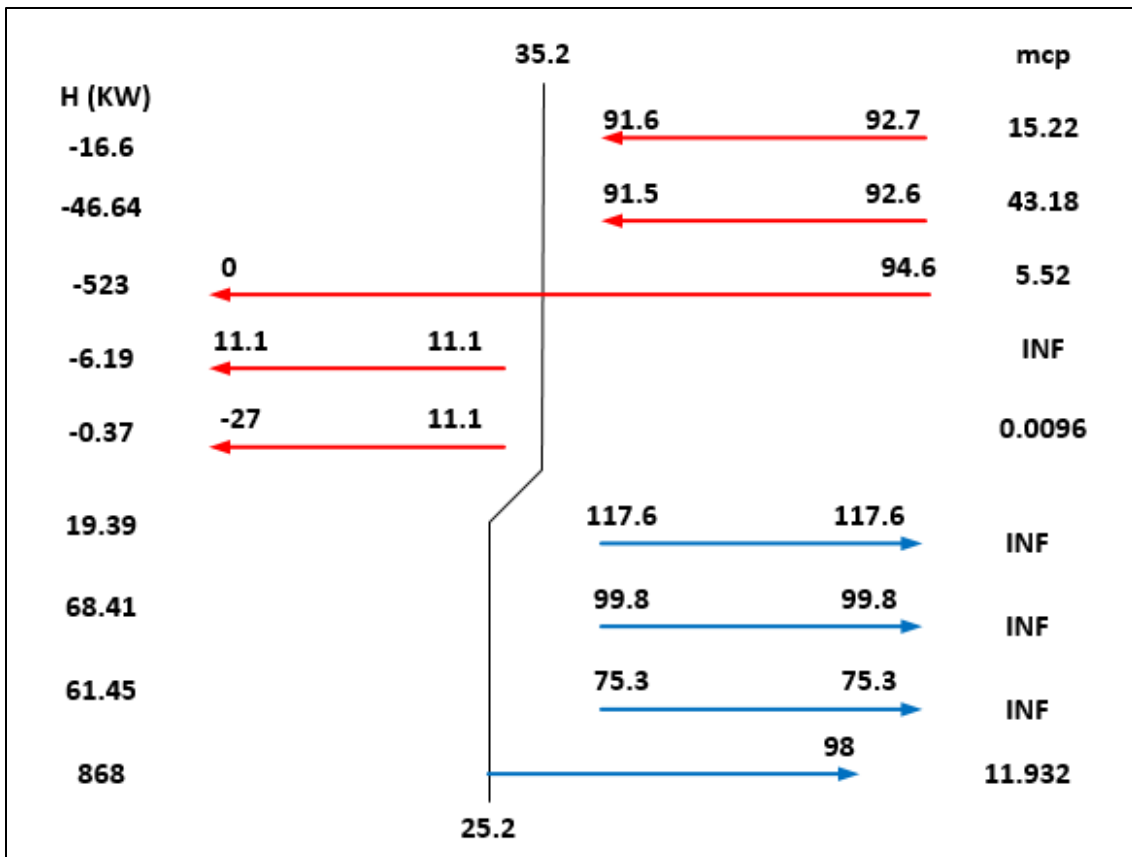


Figura 30. Corrientes sobre el pinch. 8 g/L en la alimentación

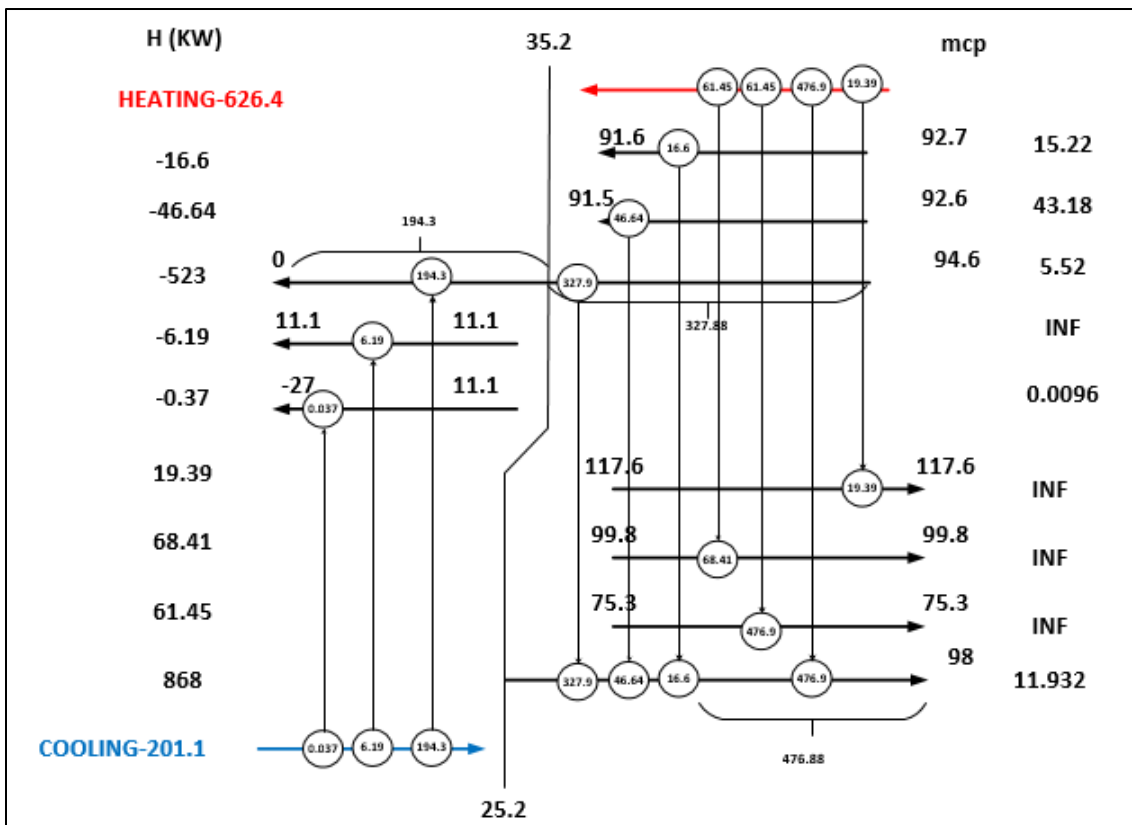


Figura 31. Integración energética. 8 g/L en la alimentación

7.2. CONCENTRACIÓN DE 12 g/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN

La tabla 55 muestra las corrientes integradas energéticamente.

TAGNAME	T1	T2	AH (kW)
FEED	25,19	98	868,8
F1	93,33	0	-558,2
ACEAIR	49,36	49,36	-9,0
F2	49,36	20,69	-0,1
BUT+WAT	74,74	74,74	70,4
BUTANOL	117,63	117,63	29,2
AGUA	99,8	99,8	75,8
B-V	92,62	91,54	-24,7
A-V	92,61	91,49	-51,2

Tabla 55. Corrientes de integración energética. 12 g/L en la alimentación

Se logra conseguir un ahorro energético en el calentamiento y en la refrigeración del 41.46% y del 67.28%.

En las figuras 32 y 33 se representan las corrientes sobre el pinch.

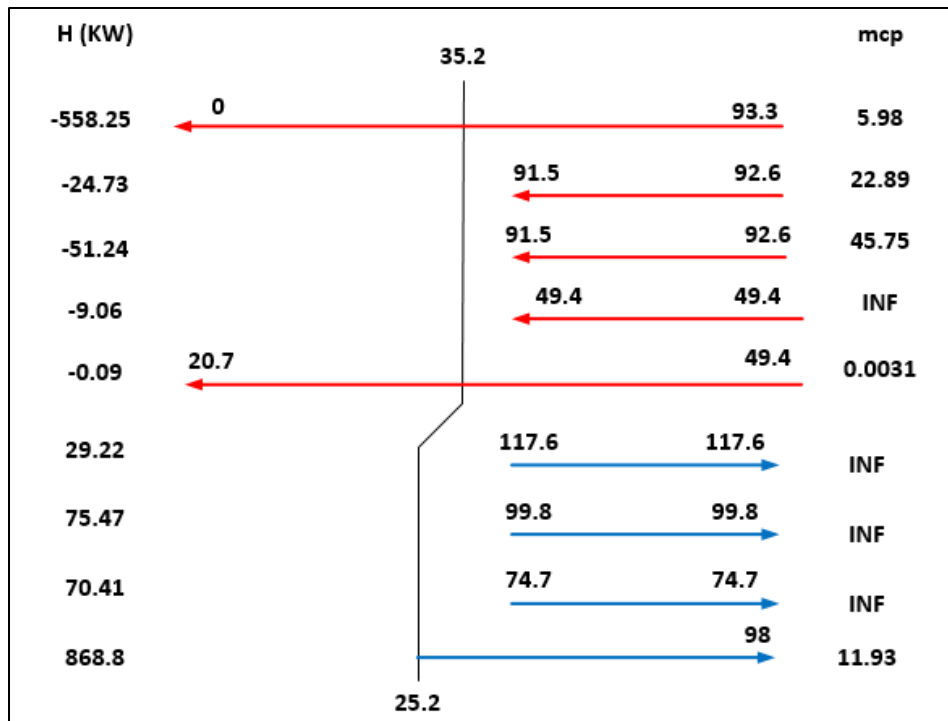


Figura 32. Corrientes sobre el pinch. 12 g/L en la alimentación

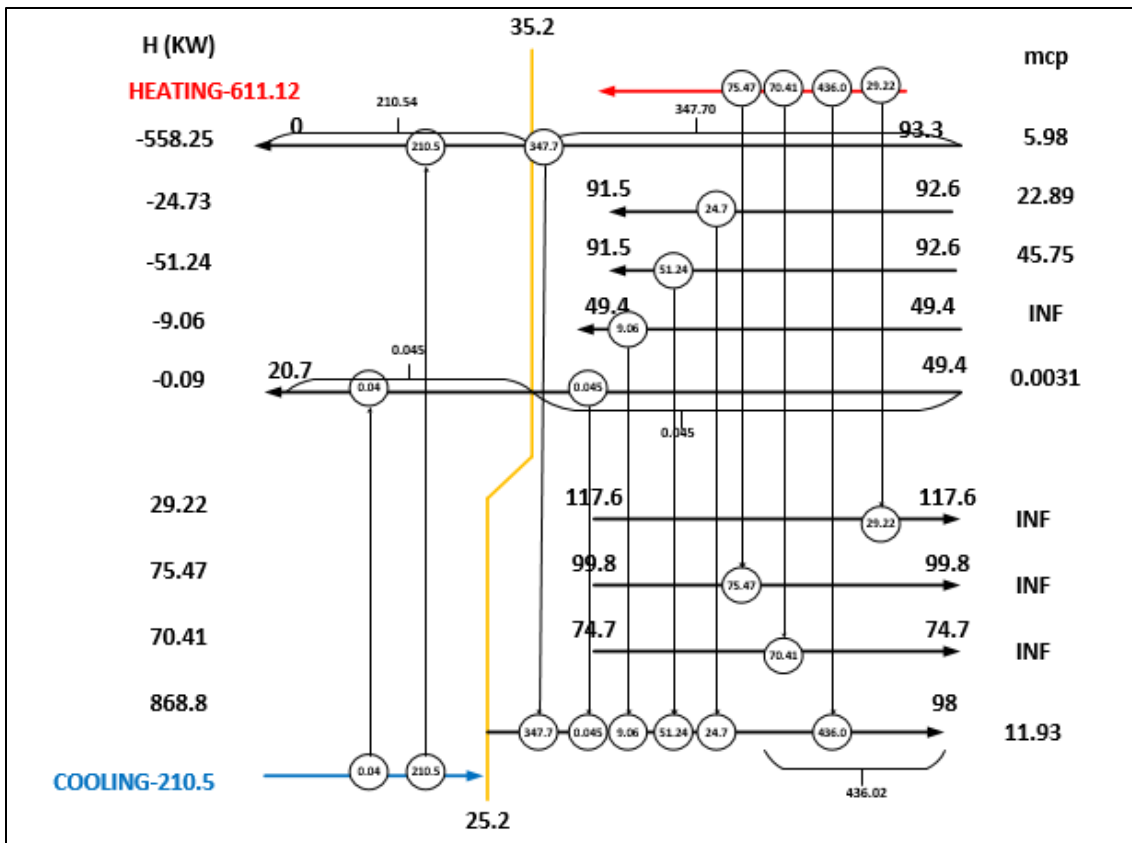


Figura 33. Integración energética. 12 g/L en la alimentación

7.3. CONCENTRACIÓN DE 16 g/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN

La tabla 56 muestra las corrientes integradas energéticamente bajo las condiciones iniciales de 16 g/L de butanol.

TAGNAME	T1	T2	AH (kW)
FEED	25,19	98	867,8
F1	91,94	0	-596,9
ACEAIR	60,2	60,2	-13,4
F2	60,2	26,84	-1,4
BUT+WAT	74,49	74,49	80,1
BUTANOL	117,63	117,63	38,8
AGUA	99,8	99,8	81,9
B-V	92,61	91,5	-32,6
A-V	92,59	91,43	-55,5

Tabla 56. Corrientes de integración energética. 16 g/L en la alimentación

Se consigue un ahorro del 44.06% en la calefacción y del 67.3% en la refrigeración

Las figuras 34 y 35 muestran las corrientes integradas sobre el pinch.

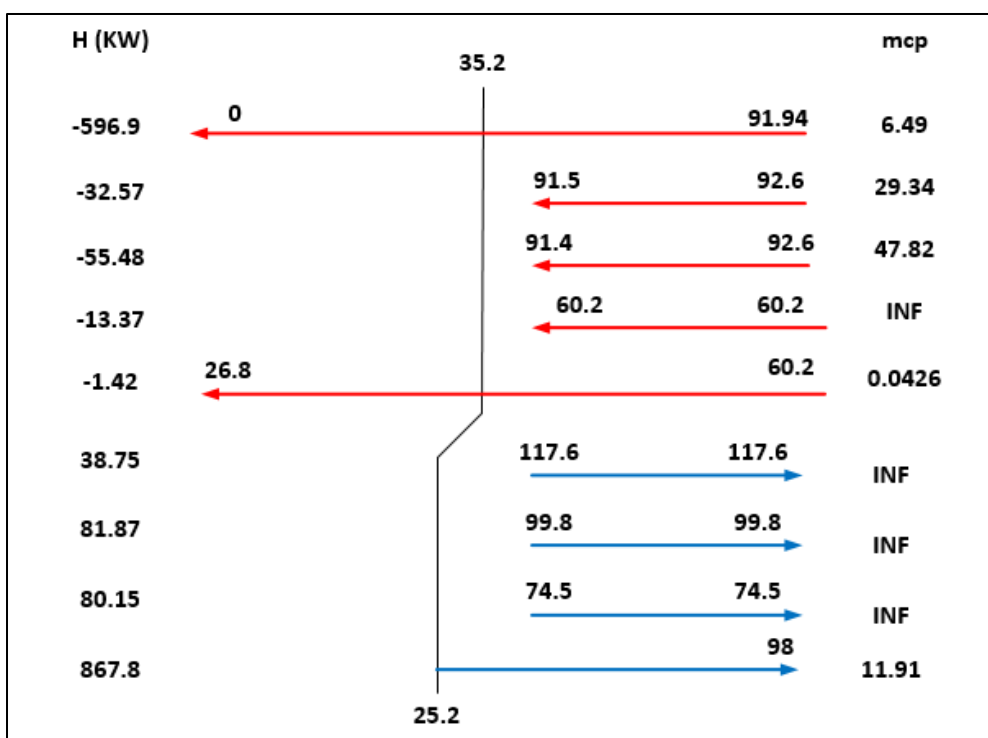


Figura 34. Corrientes sobre el pinch. 16 g/L en la alimentación

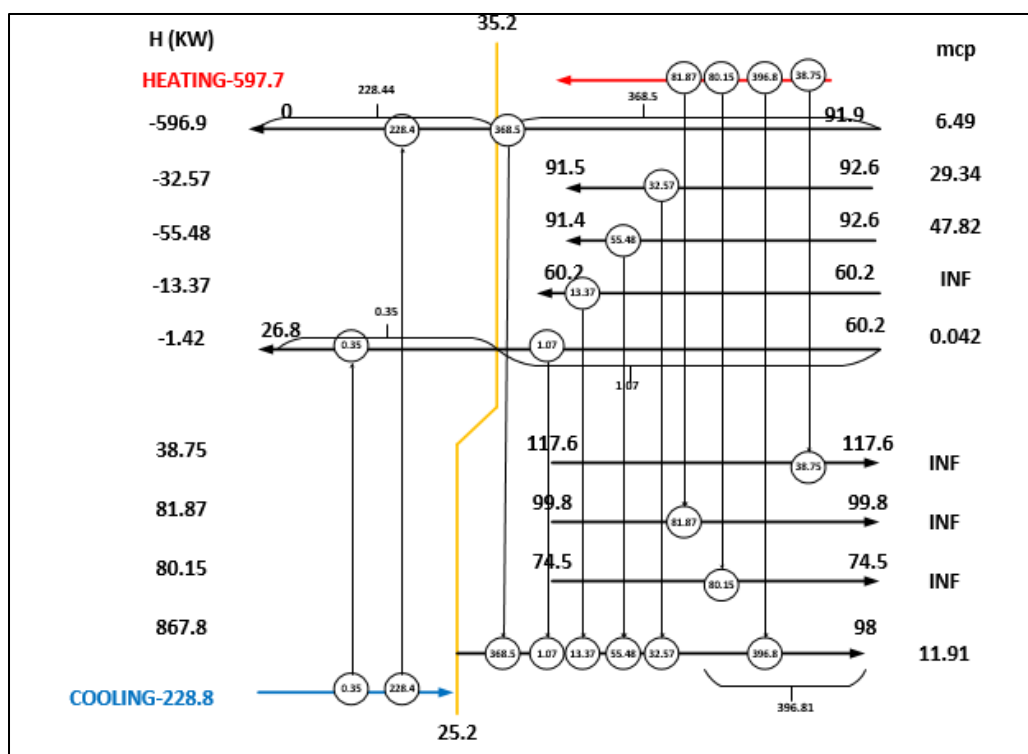


Figura 35. Integración energética. 16 g/L en la alimentación

7.4. CONCENTRACIÓN DE 18 g/L DE BUTANOL EN LA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN

La tabla 57 muestra las corrientes con las que se ha realizado la integración energética.

TAGNAME	T1	T2	AH (kW)
FEED	25,19	98	867,6
F1	91,46	0	-607,7
ACEAIR	65,6	65,6	-14,8
F2	65,6	30,56	-1,6
BUT+WAT	74,41	74,41	84,3
BUTANOL	117,63	117,63	43,3
AGUA	99,8	99,8	82,9
B-V	92,61	91,50	-36,3
A-V	92,59	91,43	-56,1

Tabla 57. Corrientes de integración energética. 18 g/L en la alimentación

Se consigue un ahorro del 44.7% en la calefacción y del 67.34% en la refrigeración.

Las siguientes figuras muestran las corrientes sobre el pinch.

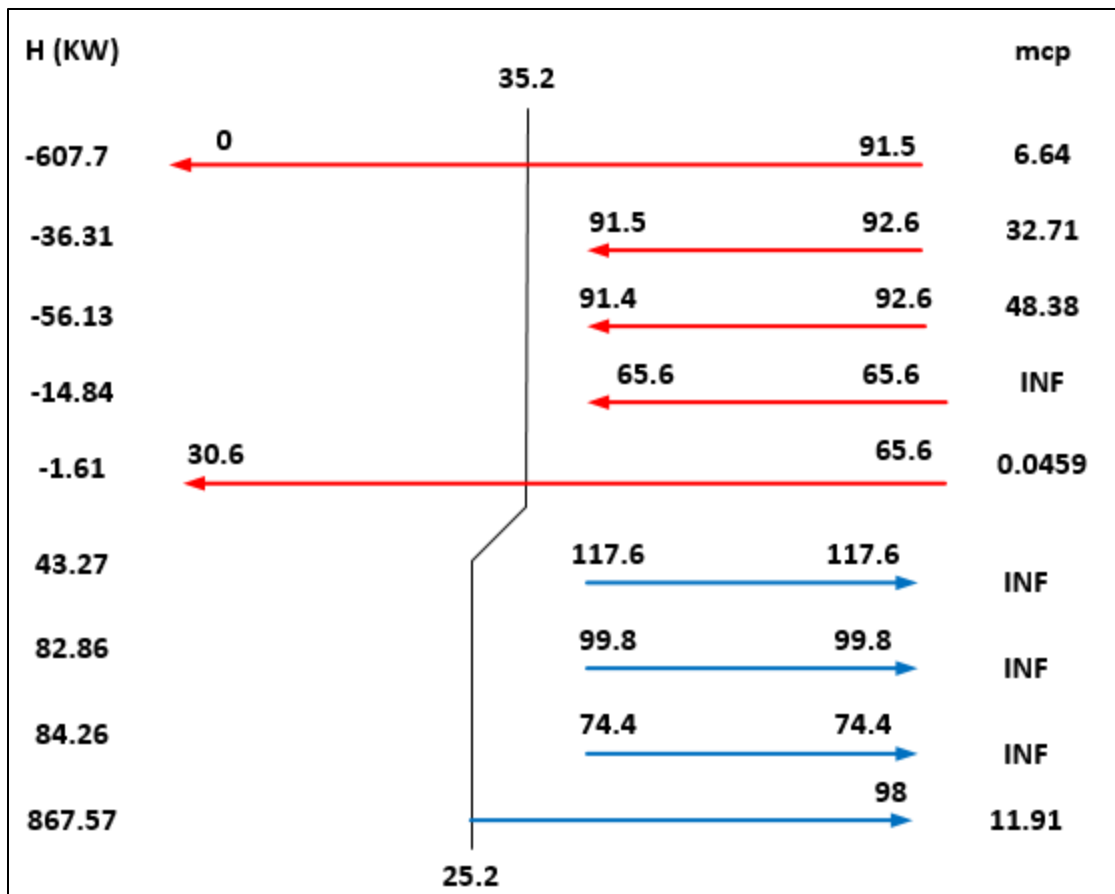


Figura 36. Corrientes sobre el pinch. 18 g/L en la alimentación

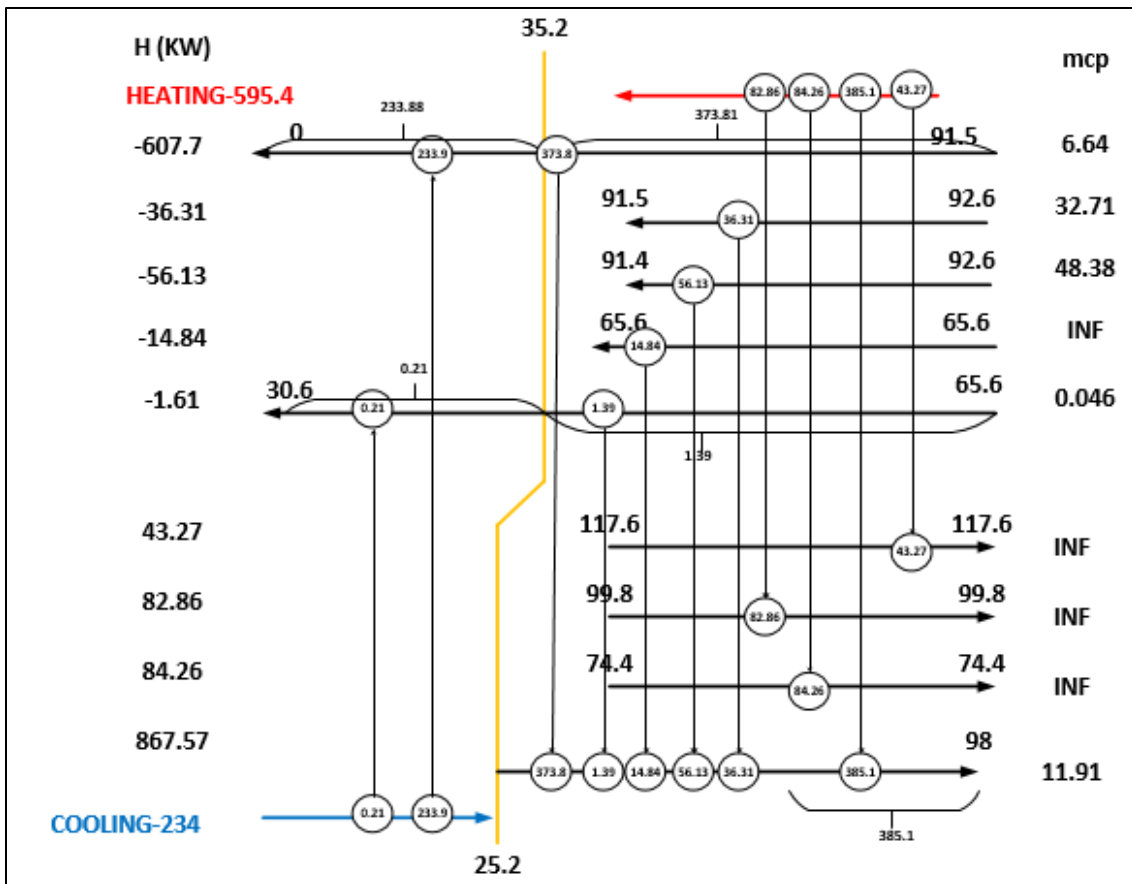


Figura 37. Integración energética. 18 g/L en la alimentación

Como se ve en la tabla 58, a medida que se aumenta la concentración de butanol a la entrada, la energía requerida en la calefacción disminuye, pero la necesaria para el enfriamiento aumenta en mayor medida. Es por eso que **el total de energía de los servicios generales crece a medida que lo hace la concentración de butanol a la entrada.**

g/L BUTANOL	HEATING (kW)	COOLING (kW)	TOTAL (kW)
8	626,4	201,1	827,5
12	611,1	210,5	821,6
16	597,7	228,8	826,5
18	595,4	234	829,4

Tabla 58. Resumen de necesidades energéticas de los servicios generales.

Los cálculos para determinar los nuevos precios de butanol y acetona se han realizado de la misma manera a la ya realizada anteriormente.

La tabla 59 muestra un resumen de tanto los costes de servicios generales y de operación y los precios para garantizar un mismo porcentaje de rentabilidad.

Se observa claramente cómo se reducen los costes de servicios generales y por consiguiente los costes de operación. Sin embargo, no se traduce en una gran disminución del precio de salida del butanol, ya que los costes de implementación pesan demasiado en el balance final. **Aunque se haya conseguido rentabilizar el proceso, no es todavía lo suficientemente rentable respecto a la destilación convencional.**

BUTANOL/ACETONA (g/L)	ALTERNATIVA	COSTES DE OPERACIÓN (USD/Y)		COSTES DE SERVICIOS GENERALES (USD/Y)		PRECIO BUTANOL (USD/kg)		PRECIO ACETONA (USD/kg)	
		CON INTEGRACIÓN	SIN INTEGRACIÓN	CON INTEGRACIÓN	SIN INTEGRACIÓN	CON INTEGRACIÓN	SIN INTEGRACIÓN	CON INTEGRACIÓN	SIN INTEGRACIÓN
8/2	GAS DE ARRASTRE	1,83E+06	1,94E+06	1,75E+05	2,85E+05	4,40	4,54	3,89	4,02
12/3	GAS DE ARRASTRE	1,85E+06	1,96E+06	1,69E+05	2,93E+05	3,05	3,15	2,70	2,79
16/4	GAS DE ARRASTRE	1,83E+06	1,97E+06	1,66E+05	3,01E+05	2,20	2,28	1,94	2,02
18/4,5	GAS DE ARRASTRE	1,83E+06	1,98E+06	1,65E+05	3,03E+05	2,06	2,15	1,83	1,90

Tabla 59. Resumen de costes y precios tras integración energética.

8. CONCLUSIONES

8. CONCLUSIONES

En base a los objetivos planteados en el presente trabajo fin de grado, se presentan las conclusiones más relevantes:

- La alternativa de separación de solventes ABE energéticamente más favorable es la de gas de arrastre. Además, es la única en la que la integración energética es rentable, consiguiendo ahorros entre el 60% y 70%.
- La destilación convencional supone la alternativa más económica. A pesar de que el gasto energético es mayor que en el gas de arrastre, el gasto de equipos y el coste anual de operación es mucho menor. Además, el porcentaje de recuperación de los productos es bastante más alto, lo que rentabiliza aún más el proceso.
- La alternativa de destilación híbrida más óptima es aquella en la que la separación final se realiza mediante una sola torre de destilación. Sin embargo, hay que tratar los efluentes antes de su recirculación. Aquellas corrientes con alto contenido en materia orgánica se pueden llevar a digestores anaerobios con el fin de producir biogás que contribuya a rentabilizar el proceso.
- El análisis de sensibilidad de la concentración de solventes en el caldo de fermentación, muestra que, al aumentar la concentración de butanol y acetona en el caldo, los precios de venta se reducen considerablemente. Esto se debe al mayor flujo de productos a la salida.

En resumen, se deben buscar nuevas formas de tratar de rentabilizar más el proceso, tales como plantas de producción más grandes que permitan procesar mayores flujos. Otra opción, es alimentar a la fase de separación caldos de fermentación más concentrados. En este sentido, podría resultar muy ventajoso la aplicación de procesos de pervaporación a continuación de la fermentación para concentrar los caldos, seguida de una destilación para separar y purificar.

9. BIBLIOGRAFÍA

9. BIBLIOGRAFÍA

- [1]. IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change. (2017). *Ipcc.ch*. Fecha de consulta: 27 June 2017, from http://www.ipcc.ch/home_languages_main_spanish.shtml
- [2]. *Tipos de biocombustibles*. (2017). *Energías Renovables*. Fecha de consulta: 27 June 2017, from <http://www.energiasrenovablesinfo.com/biomasa/tipos-biocombustibles/>
- [3]. Lee, S., Park, J., Jang, S., Nielsen, L., Kim, J., & Jung, K. (2008). Fermentative butanol production by clostridia. *Biotechnology And Bioengineering*, 101(2), 209-228.
- [4]. Donaldson, G., Huang, L., Maggio-Hall, L., Nagarajan, V., Nakamura CE, C., & Suh, W. (2007). Fermentative Production of Four Carbon Alcohols. US.
- [5]. *StartLogic*. (2017). *Butanol.com*. Fecha de consulta: 27 June 2017, from <http://www.butanol.com>
- [6]. Green, E. (2011). Fermentative production of butanol—the industrial perspective. *Current Opinion In Biotechnology*, 22(3), 337-343.
- [7]. Etanol. (2014). Fecha de consulta: 27 June 2017, from <http://www.osinerg.gob.pe/Resoluciones/pdf/2011/Informe-No.0006-2011-GART.Anexo3.pdf>
- [8]. Ministerio de Industria Turismo y Comercio. *Resumen del Plan de Energías Renovables 2011-2020*.
- [9]. Glenister, D., & Nunes, V. (2011). Entendiendo la producción sostenible de biocombustibles: directiva de la UE sobre energías renovables e iniciativas internacionales para verificar la sostenibilidad. Fecha de consulta: 27 June 2017 from <http://www.sgs.co/~media/Global/Documents/White%20Papers/sgs-biofuel-whitepaper-a4-es-11-v1.ashx>
- [10]. *Historia de la fermentacion*. (2017). Fecha de consulta: 27 June 2017, from [http://www.responsiblebusiness.eu/display/rebwp7/Acetone,+Butanol,+Ethanol+\(ABE\)+Fermentation](http://www.responsiblebusiness.eu/display/rebwp7/Acetone,+Butanol,+Ethanol+(ABE)+Fermentation).
- [11]. Zhou, H., Su, Y., Chen, X., & Wan, Y. (2011). Separation of acetone, butanol and ethanol (ABE) from dilute aqueous solutions by silicalite-1/PDMS hybrid pervaporation membranes. *Separation And Purification Technology*, 79(3), 375-384.
- [12]. *Butamax® Advanced Biofuels*. (2017). *Butamax.com*. Fecha de consulta: 27 June 2017, from <http://www.butamax.com/>.
- [13]. Qureshi, N., Meagher, M., & Hutkins, R. (1999). Recovery of butanol from model solutions and fermentation broth using a silicalite/silicone membrane1. *Journal Of Membrane Science*, 158(1-2), 115-125.

- [14]. Daza Montaña, C. (2009). *Process design and evaluation of butanol production from lignocellulosic biomass*. Finland. Fecha de consulta: 27 June 2017 from <https://www.ecn.nl/publications/PdfFetch.aspx?nr=ECN-L--09-117>
- [15] Ezeji, T., & Blaschek, H. (2008). Fermentation of dried distillers' grains and solubles (DDGS) hydrolysates to solvents and value-added products by solventogenic clostridia. *Bioresource Technology*, 99(12), 5232-5242.
- [16]. "Ezeji, T., Qureshi, N., & Blaschek, H. (2007). Bioproduction of butanol from biomass: from genes to bioreactors. *Current Opinion In Biotechnology*, 18(3), 220-227.
- [17]. Raganati, F., Olivieri, G., Salatino, P., Marzocchella, A., & Salemme, L. (2016). Analysis of the energy efficiency of some butanol recovery processes. *Chemical engineering transactions*, 49, 109-114.
- [18]. Niemistö, J., Kujawski, W., & Keiski, R. (2013). Pervaporation performance of composite poly(dimethyl siloxane) membrane for butanol recovery from model solutions. *Journal Of Membrane Science*, 434, 55-64.
- [19]. Qureshi, N., Blaschek, H., & Ezeji, T. (2003). Production of acetone butanol ethanol by *Clostridium beijerinckii* BA101 and in-situ recovery by gas stripping. *World Journal Of Microbiology And Biotechnology*, 15(4), 594-602.
- [20]. Qureshi, N., Hughes, S., Maddox, I., & Cotta, M. (2005). Energy-efficient recovery of butanol from model solutions and fermentation broth by adsorption. *Bioprocess And Biosystems Engineering*, 27(4), 215-222
- [21]. Kraemer, K., Harwardt, A., Bronneberg, R., & Marquardt, W. (2011). Separation of butanol from acetone–butanol–ethanol fermentation by a hybrid extraction–distillation process. *Computers & Chemical Engineering*, 35(5), 949-963.
- [22]. Qureshi, N., & Maddox, I. (2005). Reduction in Butanol Inhibition by Perstraction. *Food And Bioproducts Processing*, 83(1), 43-52.
- [23]. Qureshi, N., & Ezeji, T. (2008). Butanol, 'a superior biofuel' production from agricultural residues (renewable biomass): recent progress in technology. *Biofuels, Bioproducts And Biorefining*, 2(4), 319-330.
- [24]. Mariano, A., Keshtkar, M., Atala, D., Maugeri Filho, F., Wolf Maciel, M., Maciel Filho, R., & Stuart, P. (2011). Energy Requirements for Butanol Recovery Using the Flash Fermentation Technology. *Energy & Fuels*, 25(5), 2347-2355.
- [25]. Bellido, C., Infante, C., Coca, M., González-Benito, G., Lucas, S., & García-Cubero, M. (2015). Efficient acetone–butanol–ethanol production by *Clostridium beijerinckii* from sugar beet pulp. *Bioresource Technology*, 190, 332-338