

Design and simulation of distillation schemes for the purification of bio-products.

Diseño y simulación de esquemas de destilación para la purificación de bio-productos.

Antonio José Martínez-Méndez¹.Lucia Moreno-Ruvalcaba¹.Mariana Vargas-Ortega¹.Tania Gisell Salgado-Rodriguez¹, Heriberto Alcocer-Garcia².

¹Departamento de Ingeniería Química. Universidad de Guanajuato. Noria Alta S/N. Guanajuato.Gto., 36050. México. ² Departamento de Ingeniería Civil y Ambiental. Universidad de Guanajuato. Av. Benito Juárez 77. Guanajuato. Gto., 36000. México.

h.alcocergarcia@ugto.mx¹

Resumen

Los problemas ambientales que sufre en la actualidad el planeta, como el cambio climático o la contaminación, evidencian que el actual modelo económico es insostenible. Innovar sobre el uso de la biomasa con un enfoque sostenible, y conocer los bio-productos que demanda el mercado, son retos a los que se sigue enfrentando la industria. La producción de bio-productos a partir de biomasa residual ofrece una alternativa prometedora y sostenible en comparación con los métodos tradicionales basados en derivados del petróleo. Sin embargo, existen desafíos técnicos, económicos y de gestión que limitan la viabilidad y la sostenibilidad de esta producción. La calidad de la materia prima, tecnologías de conversión, rendimiento y selectividad de proceso. Además, se examinan los desafíos en la cadena de suministro, la rentabilidad económica, la valorización eficiente de los residuos y la minimización del impacto ambiental.

La OCDE (Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos) sostiene que, para 2030, el 30% de todos los productos químicos serán de origen biológico (a medida que las empresas químicas realicen la transición a empresas bioquímicas). El mercado de los productos químicos de origen biológico crecerá entre 2020 y 2024 a un ritmo del 11% durante el periodo previsto. Sin embargo, estos mercados solo se han centrado en optimizar el coste total anual, perdiendo de vista el impacto ambiental del proceso. Por lo tanto, una de las grandes limitantes de la obtención de productos provenientes de biomasa son los altos consumos de energía para su obtención, por lo que la reducción del consumo de energía del proceso ofrecería mayores posibilidades en su producción a gran escala, así como, viable económicamente. En este proyecto se plantea proponer procesos para la producción y purificación de bio-productos que reduzcan el consumo energético y con ello obtener procesos que se apeguen a los conceptos de sostenibilidad, química verde y economía circular. En este trabajo nos enfocamos en la purificación de dos bio-productos de alto interés, como lo son el ácido levulínico y el 2-Metiltetrahidrofurano (2-MTHF).

En el proceso de producción de ácido levulínico, una vez ocurrida la reacción se obtiene una corriente con abundante agua, es por ello que la mayor cantidad de agua se elimina mediante una columna de extracción líquido-líquido, luego la corriente concentrada en ácido levulínico, furfural y ácido fórmico se purifica mediante un tren de columnas de destilación. Debido a que a que la destilación es uno de los métodos de separación con mayor consumo energético, es importante su estudio mediante la síntesis de proceso. Por tanto, se propusieron 5 diseños con arreglos convencionales para su purificación posterior a la zona de extracción líquido-líquido. Para los diseños que se logro obtener las purezas requeridas se implementó una interfaz de optimización, con el objetivo de obtener mejores diseños, el algoritmo que se propuso fue el de evolución diferencial con lista tabú, y se tomaron como funciones objetivo la minimización del costo total anual y del impacto ambiental mediante el eco indicador 99. De los 5 diseños propuestos, solo 5 fueron factibles debido a que los otros dos presentan una azeotropo haciendo imposible llegar a las recuperaciones y purezas deseadas.

Además, conociendo la importancia industrial del 2-MTHF se implementaron estrategias de diseño para poder alcanzar mayor pureza en su etapa de purificación, se propusieron esquemas donde se implementaron decantadores, columnas flash y arreglos convencionales. Obteniendo que el diseño convencional obtuvo los mejores resultados alcanzando una pureza del 94% en masa.

Palabras clave: Biomasa; bio-productos; diseño de procesos; destilación, Acido levulínico; 2-metiltetrahidrofurano.

El potencial de la biomasa como fuente renovable de bio-productos.

La biomasa es la materia orgánica que puede ser utilizada como fuente de energía que se transforma en subproductos que pueden utilizarse como combustible en diferentes aprovechamientos energéticos. La biomasa se clasifica en dos grupos principalmente, en función de los elementos que se utilizan para su producción: natural, residual. Estos bio-productos son un componente básico de los sistemas sustentables por su contribución en la reducción de insumos externos, por mejorar la calidad y cantidad de los recursos internos, y por su inocuidad; además, pueden ser generados a partir de recursos locales y promover el desarrollo regional endógeno [1].

El concepto de biorrefinería evolucionó a finales de la década de 1990; las biorrefinerías son la alternativa renovable a las refinerías de petróleo. Se prevé que utilicen biomasa (cultivos, hierba, residuos agrícolas, madera y residuos municipales) como materia prima de carbono renovable para producir principalmente biocombustibles (por ejemplo, etanol, biodiésel, biogasolina, hidrógeno, metano, etc.) y productos químicos (adhesivos, revestimientos, papel, polímeros). Los carbohidratos de cinco y seis carbonos presentes en la biomasa lignocelulósica pueden someterse a reacciones selectivas de deshidratación, hidrogenación y oxidación para dar lugar a productos de alto valor añadido, como sorbitol, furfural, ácido glucárico, hidroximetilfurfural y ácido levulínico. Los mercados de bio-productos están dominados por unas pocas empresas, que crecen a un ritmo acelerado. El Banco Mundial sostiene que el desarrollo agrícola es uno de los mecanismos más prometedores para mitigar la pobreza extrema [2]. Por ejemplo, la producción de productos químicos de valor añadido a partir de la biomasa podría ofrecer nuevas oportunidades a los agricultores para generar ingresos a partir de los residuos agrícolas (creando una bioeconomía); además, el uso eficaz y controlado de los residuos de biomasa puede ayudar a mitigar los peligros medioambientales asociados a la combustión. Desde 2007, ha aumentado el número de instalaciones de producción a escala comercial de productos químicos de base biológica (bioquímicos) y también está aumentando el número de productos que llegan al mercado. Además, la capacidad de producción del sector de los productos químicos de base biológica ha crecido más rápidamente que la del sector de los productos químicos de base fósil, con un crecimiento anual superior al 8 % [3].



Figura 1. Diagrama general para la obtención de bio-productos.

Problemática de la biomasa

La implementación de una economía basada en la biomasa se enfrenta a desafíos relacionados con la coordinación de múltiples actores en la cadena de suministro, incluyendo agricultores, proveedores de transporte, operadores de biorrefinerías y responsables de políticas. La falta de coordinación eficiente puede afectar la eficiencia y rentabilidad de la producción de 2-MTHF. El 2-MTHF, a menudo tienen márgenes de beneficio bajos en comparación con los productos químicos convencionales. Esto plantea dificultades para lograr la viabilidad económica de la producción de 2-MTHF y

puede desalentar la inversión y desarrollo de nuevas tecnologías. Por ejemplo, la biomasa residual utilizada como materia prima para la producción de 2-MTHF debe ser valorizada de manera eficiente, minimizando la generación de residuos y maximizando la utilización de sus componentes.

El aprovechamiento adecuado de la biomasa residual es crucial para garantizar la sostenibilidad y la eficiencia de todo el proceso de producción. Esto incluye considerar las emisiones de gases de efecto invernadero, como el CO₂, y otros posibles impactos ambientales [4] La combustión de biomasa residual es una práctica común a nivel mundial que ofrece una vía sencilla para gestionar los residuos agrícolas. en todo el mundo que proporciona una vía sencilla para gestionar los residuos agrícolas. Sin embargo, las emisiones mundiales de CO₂ de esta estrategia de gestión se estiman en 8.680 millones de toneladas. De todas las emisiones antropogénicas, la combustión de biomasa se estima que la combustión de biomasa representa el 40% de las emisiones de CO₂, el 32% del monóxido de carbono (CO), el 20% de las partículas y el 50% de los hidrocarburos aromáticos policíclicos. Además de estas emisiones, existen otros problemas de salud pública y seguridad asociados a la combustión de biomasa, por ejemplo, el humo se libera a nivel del suelo o cerca de él, lo que provoca una exposición aguda a contaminantes concentrados en las poblaciones locales. Las condiciones de combustión pueden ser difíciles de controlar y esto puede provocar incendios forestales e ineficiencias. La combustión puede vaporizar sustancias químicas nocivas y otros gases de efecto invernadero [4].

Purificación y separación del ácido levulínico

Los procesos termoquímicos se desarrollaron inicialmente para la transformación de productos fósiles en químicos de interés para múltiples industrias. Sin embargo, en la actualidad dichos procesos se encuentran en redirección para su aplicación en la obtención de químicos de valor utilizando como materia prima la biomasa. Tal es el caso de la hidrólisis catalizada en medio ácido para la producción de bioenergéticos, así como furfural, 5-Hidroximetilfurfural y ácido levulínico [5]. El ácido levulínico obtenido por hidrólisis ácida de biomasa lignocelulósica se considera dentro de los doce principales productos químicos de la biomasa en términos de potencial económico debido a su gran número de aplicaciones. Como producto de por hidrólisis, se obtiene una corriente bastante diluida que contiene mucha agua [5].

El proceso de hidrólisis en medio ácido implementa como materia prima la biomasa de lignocelulosa, principal componente de la pared celular vegetal. La Lignocelulosa se componen principalmente de lignina, hemicelulosa y celulosa [6]. Como se mencionó anteriormente de la hemicelulosa se puede obtener el furfural y xilosa, por otra parte, la celulosa se hidroliza para obtener glucosa y a partir de esta se hidroliza en medio ácido y obtenemos como producto intermedio HMF que al ser hidratado obtenemos ácido levulínico y ácido fórmico, la composición de nuestra mezcla resultante de productos corresponde a 1-5% de furfural, 1-5% de ácido fórmico, 3-8% de ácido levulínico y el resto de agua [7].

Para la purificación de nuestra mezcla resultante, inicialmente se somete a una extracción líquido-líquido, el solvente corresponde a metil-isobutil-cetona, sin embargo, en algunos casos se utiliza furfural. Posteriormente se realiza un proceso de destilación convencional para una mezcla cuaternaria [8].

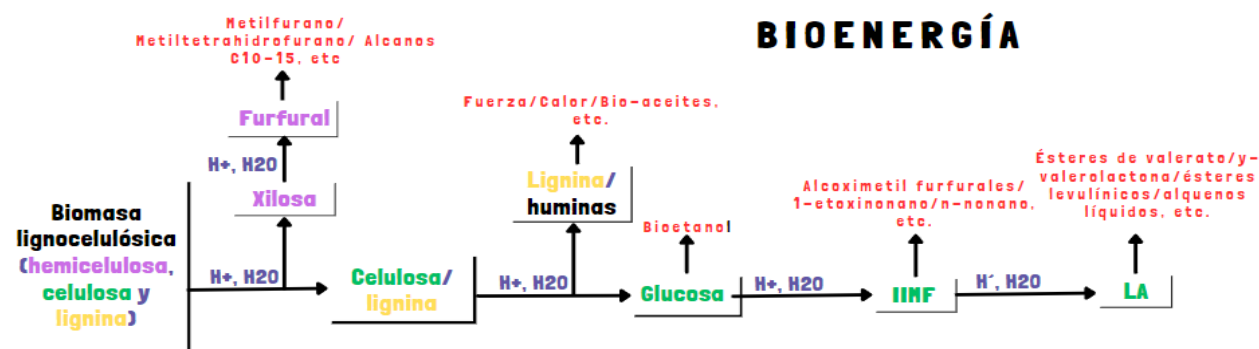


Figura 2. Diagrama de transformación de la biomasa hasta ácido levulínico.

Como se abordó con anterioridad la producción de nuestro bioproducto de interés, ácido levulinico a partir de biomasa lignoselulosica, desenvoca en una mezcla principalmente de agua, furfural, ácido formico y ácido levulinico. Inicialmente se realiza una extracción liquido-liquido, antes de pasar a la destilación convencional de acuerdo con el diseño patentado de Sebiert Frank [9]. En esta sección el diseño de las columnas es por medio de métodos rigurosos. Los métodos rigurosos se basan en escribir modelos completos para cada plato para luego resolverlos mediante alguna estrategia numérica. Después de definir las condiciones de las mezclas de entrada y la especificación de los productos deseados como parte de un problema típico de diseño de una columna de destilación, un análisis de grados de libertad indica que deben definirse dos variables adicionales para especificar el sistema, por lo tanto, lo más común es fijar la presión de diseño de la columna y la razón de reflujo.

Para enfocarnos con la destilación de la mezcla resultante de la extracción inicial, debemos fijar las características de esta, las cuales corresponden a 112668.031 kg/hr de flujo masico con una composición de 2.79% de agua (%Wt), 91.47% de Furfural (%Wt), 0.25% de Ácido Fórmico (%Wt) y 5.59% de Ácido Levulínico [10]. Nuestras purezas en peso a lograr para cada producto corresponden a 98% para el ácido levulínico, 85% para el ácido Fórmico y 99.9% para el Furfural [7,11-12].

Para el proceso de purificación del ácido levulínico y sus productos acompañantes, resultado de la hidrogenación en medio ácido de la celulosa, se implementa la destilación convencional, al tratarse de una mezcla cuaternaria, esta destilación se compone de un arreglo de tres columnas de destilación REDFRAC, para el interés de este proyecto se abordan todos los arreglos posibles a elaborar, compuestos por tres columnas REDFRAC, el cual se compone de cinco arreglos posibles presentados en la Figura 3. [8]. Para el enfoque de este proyecto desarrollo y análisis de dichos arreglos, se buscan modelar implementando el programa de Aspen Plus 8.8v con el modelo termodinámico NRTL-HOC como el seleccionado. Es importante considerar la elección del método termodinámico que dependerá de los compuestos presentes y rango de presión y temperatura del proceso a simular [13].

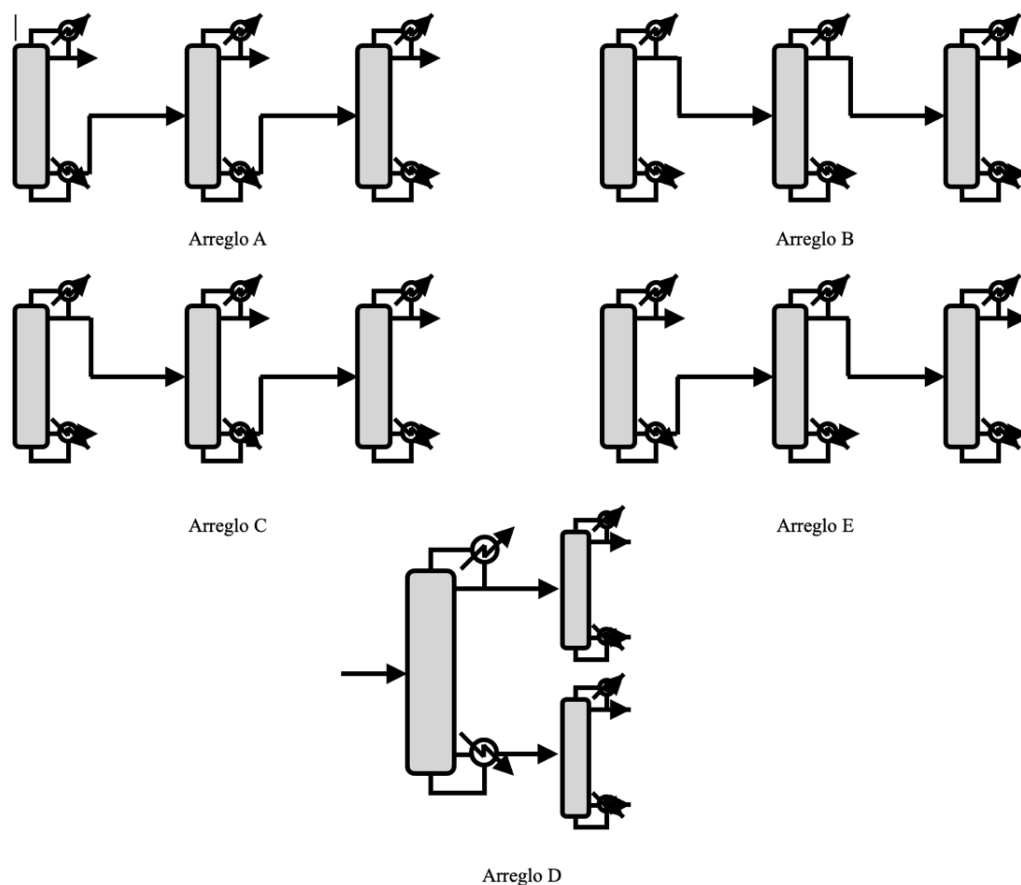


Figura 3. Arreglos de destilación para una mezcla cuaternaria.

Se busca presentar los principales resultados de la evaluación simultánea de la función multiobjetivo. Todos los resultados de optimización cumplir con todas las restricciones relacionadas con la pureza y la recuperación. Antes de se realizó la optimización, todos los diseños de casos base se modelaron y simularon en Aspen Plus utilizando la unidad RADFRAC rigurosa. Por lo tanto, todos los esquemas de proceso fueron diseñados de manera robusta considerando el conjunto completo de Ecuaciones MESH (balances de masa, relaciones de equilibrio, suma restricciones y balance de energía).

Es importante considerar la elección del método termodinámico que dependerá de los compuestos presentes y rango de presión y temperatura del proceso a simular [13].

Los parámetros de los tres diseños seleccionados (C, E, A) muestran que ninguno de los diseños variables de la optimización convergió a un valor único, convergen en un amplio rango de valores. Una de las ventajas de estas variaciones es que los diseños logran purezas superiores al mínimo exigido, sin embargo, existe un gran incremento en el trabajo de calor del rehervidor, en consecuencia, grandes valores de ambos. Por lo tanto, destaca la existencia de un azeótropo.

Producción y purificación del 2-MTHF

En la actualidad se sabe de dos procesos distintos a partir de los cuales se puede producir MTHF, uno basado en la hidrogenación y posterior hidroxigenación del furfural; y otro en la deshidratación e hidrogenación del ácido levulínico, Figuras 4 y 5.

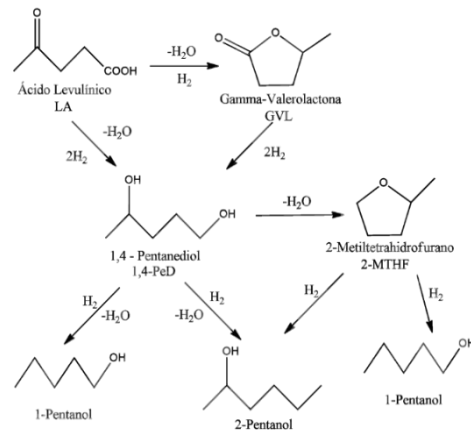
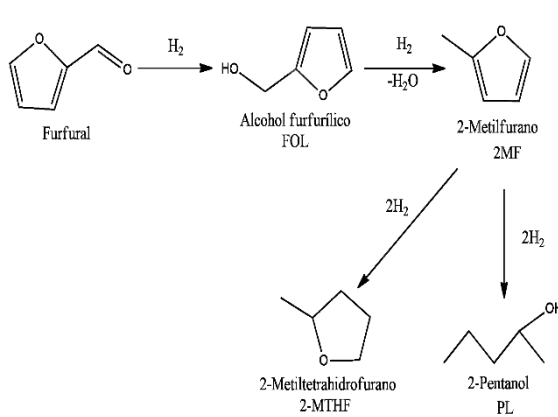


Figura 4. Ruta de obtención de 2-MTHF a partir de furfural. Figura 5. Ruta de obtención de 2-MTFH a partir de ácido levulínico.

En un trabajo de previo de Solis- Sanchez et al. [14] se estudiaron las cinéticas para la producción del 2-MTHF a partir de furfural y algunos esquemas de separación. Sin embargo, las purezas obtenidas fueron muy bajas por lo que este proyecto se propuso lograr una mejor recuperación y mayor pureza.

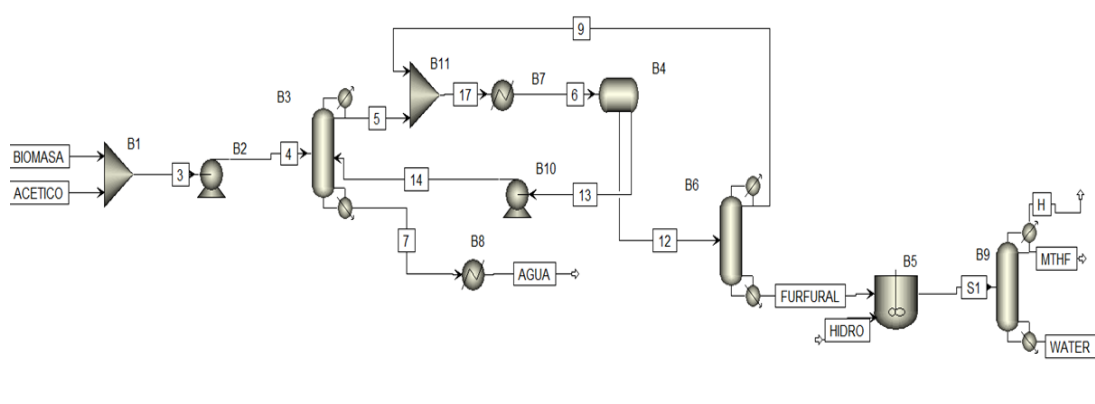


Figura 6. Esquema de producción de 2-MTHF a partir de biomasa por la vía de la hidrogenación del furfural.

Resultados

En esta sección abordaremos principalmente los resultados de las simulaciones realizadas en el programa de Aspen Plus v8.8 para los arreglos cuaternarios posibles, implementado la unidad de RADFRAC junto con el modelo termodinámico NRTL-HOC, así mismo se reportan las variables de diseño de cada columna. Así como la elaboración de la interfaz de optimización, la cual permite que con ayuda del algoritmo estocástico de evolución diferencial implementado en el programa Microsoft Office Excel en conjunto con Aspen Plus v8.8 se lleven a cabo simulaciones de los diseños presentados, modificando las especificaciones de diseño y evaluando los resultados con los indicadores de costo anual total (CAT) y eco-indicador99 (EI99). Además, se abarca la obtención de 2-MTHF de acuerdo con el diseño propuesto y la comparación con el diseño inicial.

1. Simulaciones Iniciales de Destilación Convencional

De los cinco diseños posibles de destilación convencional, únicamente tres son viables para obtener las purezas objetivo, plantadas con anterioridad, las cuales corresponden a 98% (%Wt) para el componente de ácido levulínico, 85% (%Wt) para el ácido Fórmico y 99.9% para el componente Furfural [7,11-12].

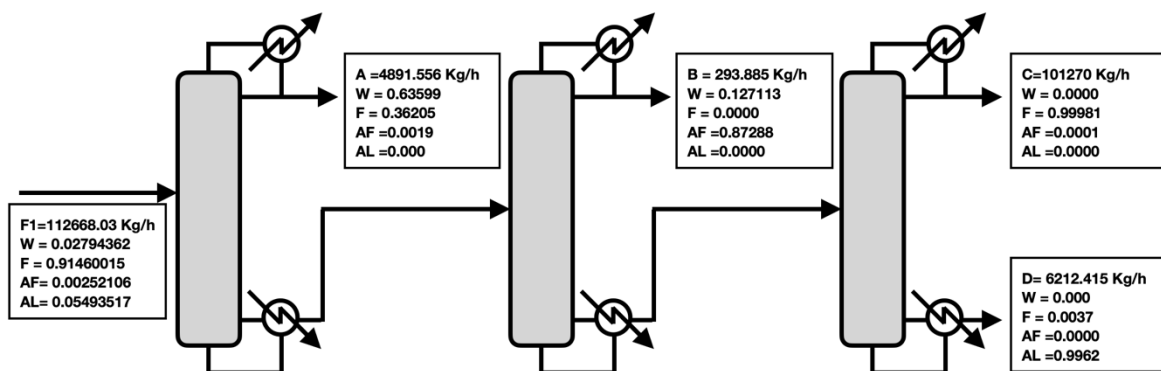


Figura 7. Balance de materia realizado a configuración A de destilado.

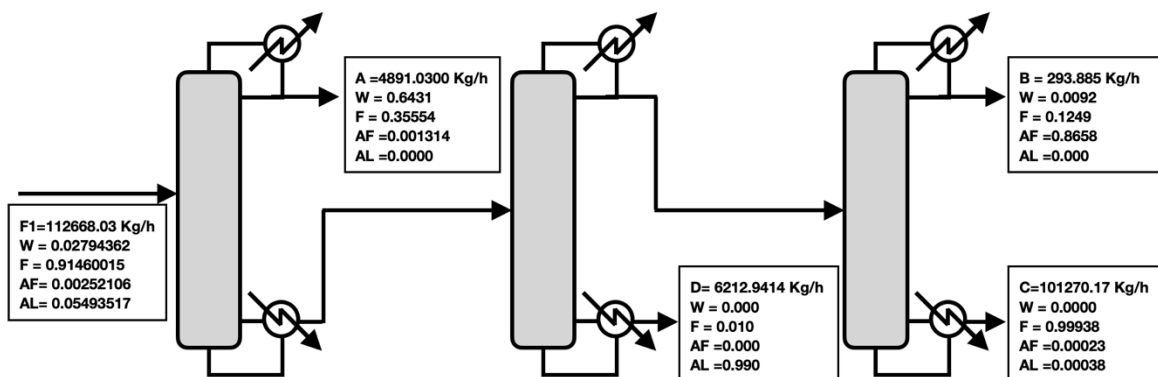


Figura 8. Balance de materia realizado a configuración C de destilación.

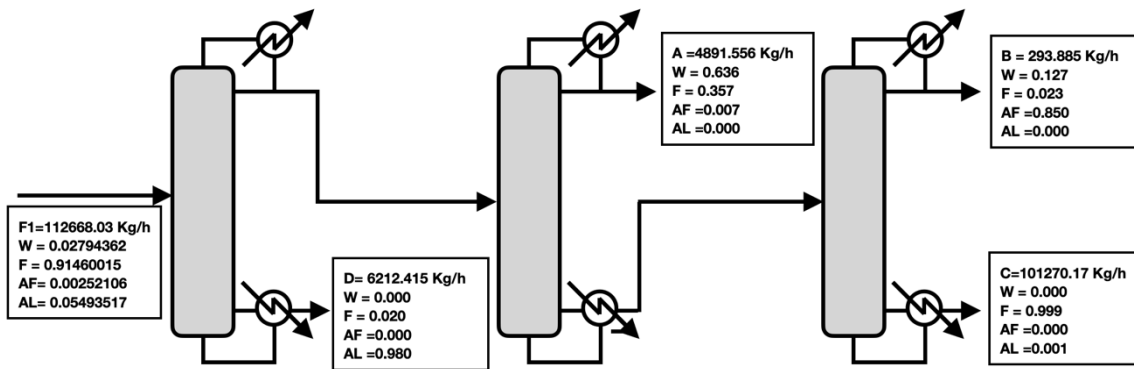


Figura 9. Balance de materia realizando a configuración E de destilado.

Para los diagramas de los diseños presentados en las Figuras. 7, 8 y 9, se disponen de las etiquetas B1, B2 y B3 para las tres columnas de cada diseño, en ese mismo orden. Esto con el fin de ayudar con la comprensión de los datos que serán presentados a continuación en la Tabla 1. Es dicha tabla se muestran las especificaciones de diseño de cada una de las columnas utilizadas en sus respectivos arreglos de destilación convencional. Además, podemos observar de primera mano las cargas térmicas presentadas en cada columna y de este modo realizar una comparación entre cada diseño.

Tabla 1. Especificaciones de Diseño de las columnas de diseño B1, B2 y B3 para los arreglos A, C y E

Especificaciones de Diseño	Arreglo A			Arreglo C			Arreglo E		
	B1	B2	B3	B1	B2	B3	B1	B2	B3
Etapas totales	30	40	30	30	30	30	32	45	60
Etapas de alimentación	14	20	15	15	15	15	15	20	30
Reflujo (kmol/hr)	3.293	588.82	105.416	19.284	338.629	386.115	1252.96	191.604	358.069
Razon de Reflujo	0.0172	77	0.1	0.1	0.31939 7	64.4	0.09046	39.5126	47.3058
Temperatura domo [°C]	97.820	105.776 6	161.362	97.81	160.61	104.563	115.728	97.881	106.138
Carga térmica fondo [Kw]	10,246.1 0	5,246.58	12456.4	10695.2 4	15682.0 7	1054.22	23,357.52 7	4647.44	4860.96
Diámetro (m)	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2	1.2

2. Presencia de Azeótropo

Se realizó un análisis de la mezcla a trabajar por medio del Programa de Aspen Plus 8.8v, implementando el modelo termodinámico NRTL-HOC, el cual nos indica la presencia de dos azeótropos resultantes entre la interacción de Agua-Furfural y Agua-Ácido fórmico.

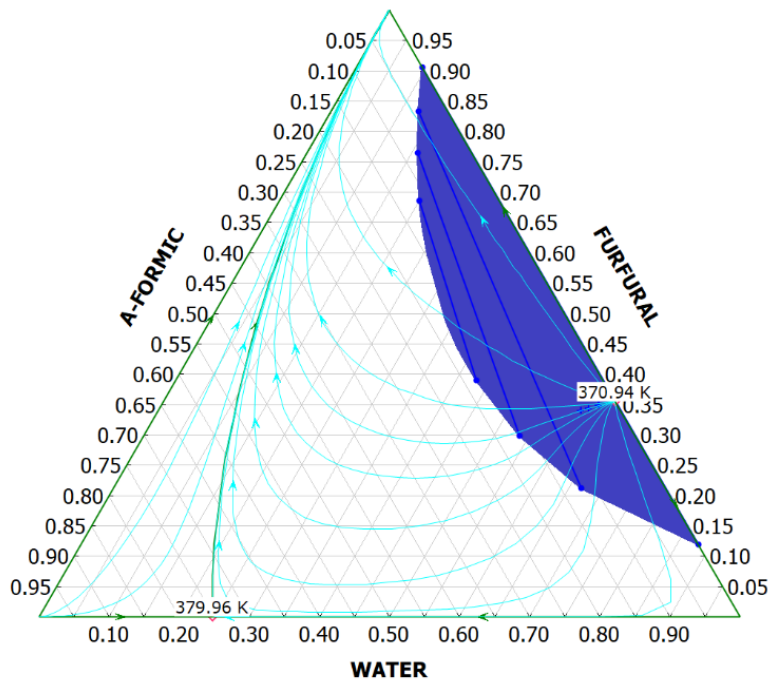


Figura 10. Diagrama ternario de la mezcla de Agua, Furfural y Ácido Fórmico.

De este modo al realizar las simulaciones de los arreglos B y D, nos encontramos a que es imposible alcanzar las purzas deseadas para el ácido fórmico puesto que una gran cantidad de Furfural se distribuye en el destilado y en el fondo de la segunda columna B2. Esto se debe principalmente a la composición del azeotropo de Agua-Furfural el cual, como se muestra en la Figura 10, la composición de este corresponde a 64.54% (% Wt) de agua y 35.46% (% Wt) de furfural Haz clic o pulse aquí para escribir texto.. Generando una cantidad de Furfural no deseada para la purificación del Ácido Formico en las columnas posteriores, tal como se muestra en la Figura 11.

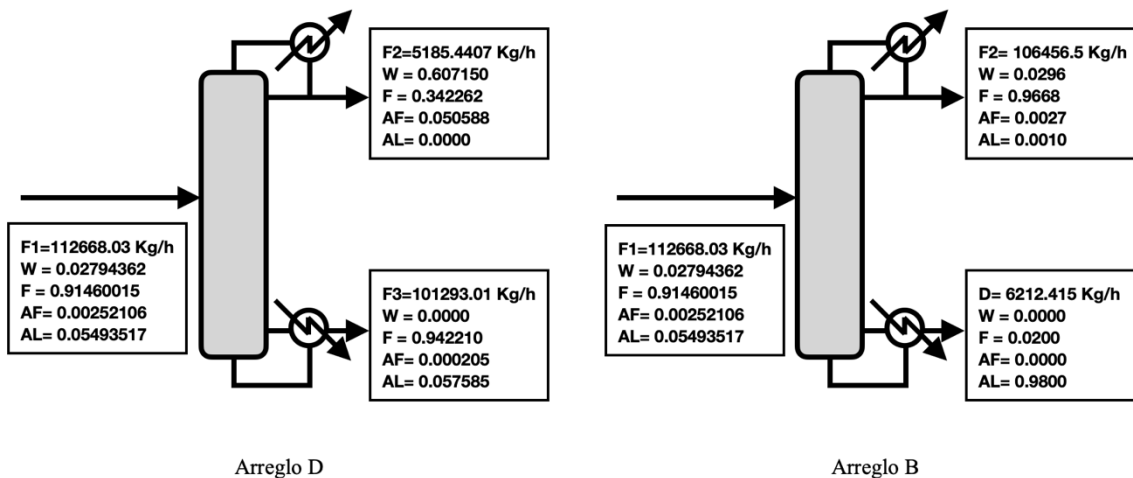


Figura 11. Balance de materia realizado a configuración B y D de destilado.

3. Elaboración de la interfaz de optimización para diseños de purificación de ácido levulínico.

Para los tres arreglos convencionales que se obtuvieron se utilizó una interfaz de optimización general para después adaptarla particularmente a cada uno de los arreglos. Esta interfaz se realizó en Excel y cuenta con varias ventanas para las diferentes operaciones: “Información”, “Resultados”, “MOOSetup”, “Output Data”; y el macro en visual Basic.

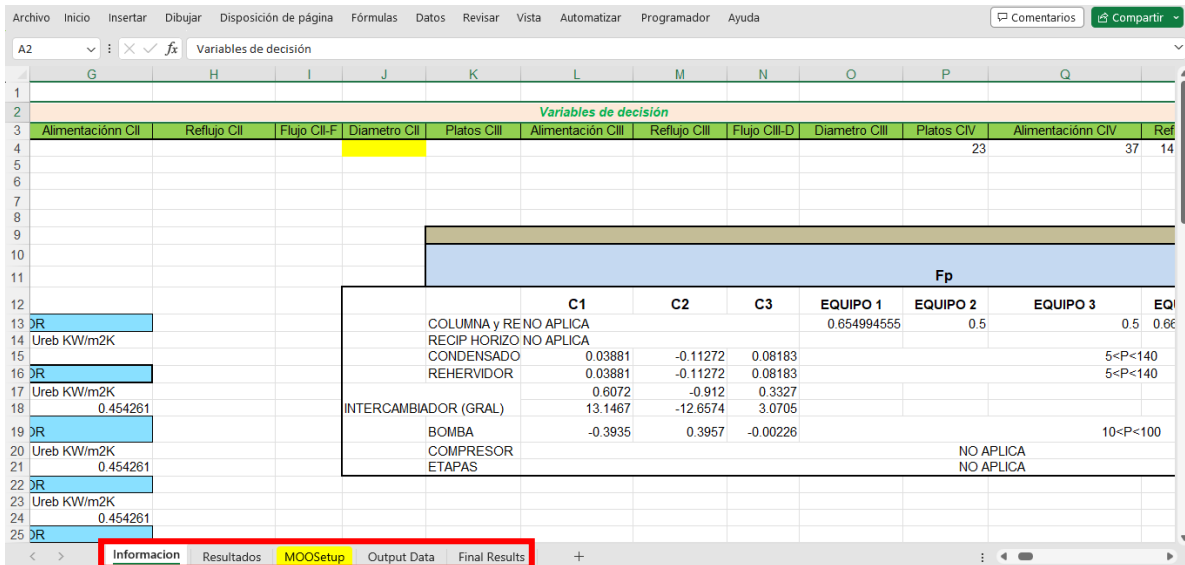


Figura 12. Interfaz de Excel para las distintas Operaciones

Las principales funciones de cada ventana son:

- MOOSetup: en este apartado se define el número de variables, el límite de estas y las funciones objetivo a resolver. Además, también se definen las propiedades con las que corre el algoritmo, el tamaño de población (individuos), el número de generaciones, etc.
- Output Data: Arroja los 10 mejores resultados de cada generación de iteraciones.
- Final results: Arroja los 120 mejores individuos de todas las generaciones realizadas
- Información: aquí se introducen todos los valores obtenidos de las columnas que se obtuvieron en Aspen y se definen penalizaciones para resultados que se alejen de las purezas deseadas para cada componente ya sea en el destilado o en el fondo, dependiendo de cada arreglo.

Los valores de número de platos, la etapa de alimentación, el reflujo, el flujo de destilado o fondo y el diámetro de cada columna, el documento de Excel los toma directamente de Aspen con el programador de “Visual Basic” a partir de las direcciones de cada dato. De forma automática Excel enlazado con Aspen realizan las iteraciones modificando las variables de acuerdo con el rango definidos en la ventana “MOOSetup”, y es así como se obtienen las mejores soluciones posibles para un arreglo.

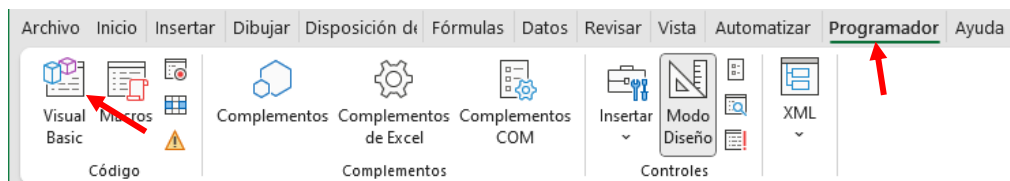


Figura 13. Acceso a Visual Basic

En la sección de Visual Basic se encuentra la carpeta de módulos, donde específicamente, en el módulo “MODE_TL” se encuentra el algoritmo de evolución diferencial, el cual se manipulo para cada arreglo con las direcciones de cada dato de las columnas tomado de Aspen en la ventana de “Variable Explorer”

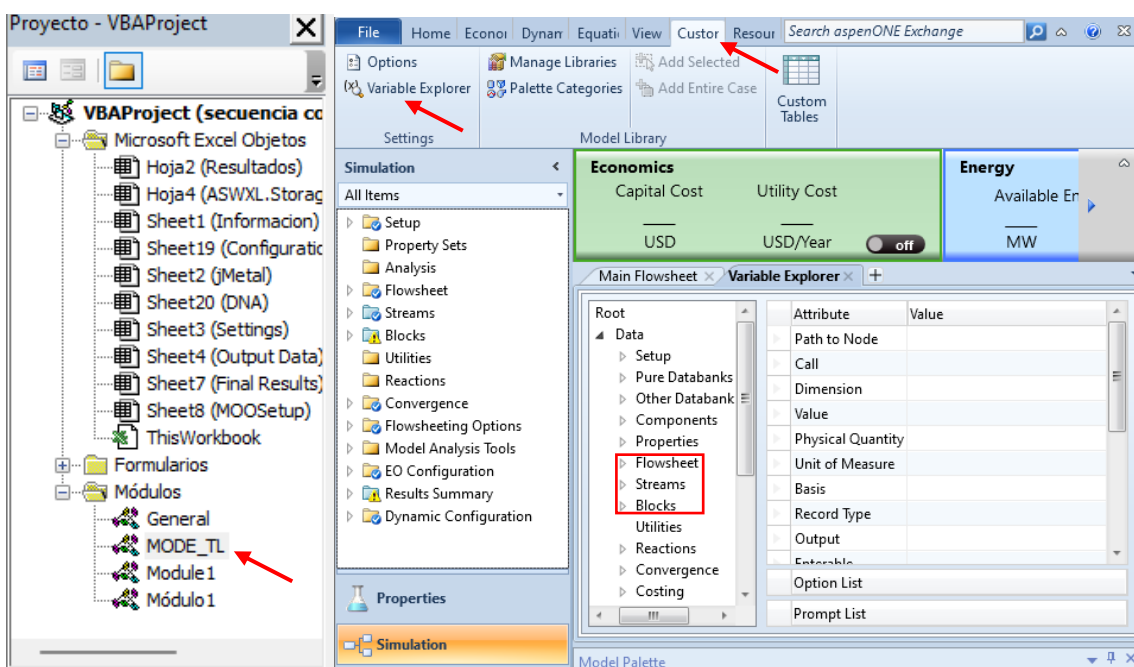


Figura 14. Ingreso de rutas de variables para el algoritmo de evolución diferencial.

4. Comparación de las columnas obtenidas para la purificación de 2-MTHF

Se obtuvieron los resultados de dos diseños de columna de separación para la obtención de 2-MTHF.

Tabla 2. Comparación de la columna de separación de 2-MTHF

Características de Diseño	Columna primer diseño	Columna rediseñada
Etapas totales	22	12
Etapas de alimentación	11	7
Reflujo (base molar)	4.2	3.17
Temperatura domo [°C]	-82	-250
Pureza de recuperado	94	88
Carga térmica fondo [cal/s]	48,694.2	39,514.2
Presión (bar)	1 .013	1.013
Diámetro (m)	0.34	0.26

Como se puede ver la diferencia de la carga térmica es notable, así como el número de etapas obtenidas, afectando en gran medida la pureza de ambos diseños.

El 2-MTHF fabricado a partir de recursos renovables es una alternativa sostenible a muchos disolventes orgánicos en la industria farmacéutica y de química fina. El 2-MTHF puede sustituir al tetrahidrofurano (THF), usado como solvente y con aplicación en biocombustibles. Es importante reconocer que dependerá del uso e implicación del producto obtenido

dentro de la industria farmacéutica requerirá de una pureza alrededor del 97%, el diseño de columna dependerá en gran medida de la aplicación; aun así, se puede mejorar el diseño a través de su optimización e implementando nuevas estrategias para su obtención.

5. Propuestas de diseño para la purificación de 2-MTHF

Se realizaron algunas propuestas para la obtención del 2-MTHF (Véase figura 15) en donde se incluía un decantador a la salida del reactor con la finalidad de separar la mayor cantidad de agua antes de entrar a la columna, sin embargo, en la simulación no se generan las dos fases orgánicas para realizar la separación. Esto se comprobó analizando las propiedades de la mezcla y a las condiciones de temperatura y presión no se encuentran presentes las dos fases.

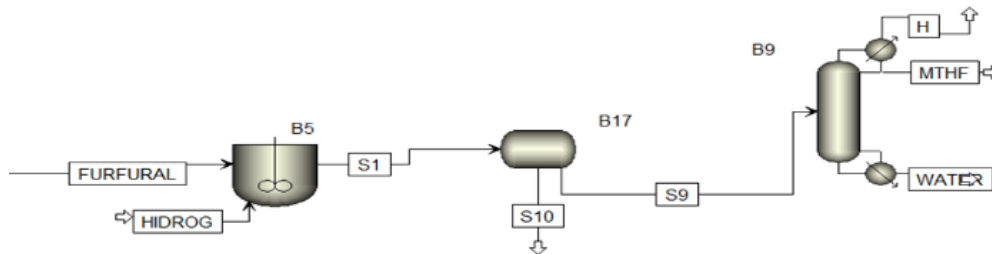


Figura 15. Esquema de propuesta 2 de producción de 2-MTHF

La siguiente propuesta generada es la integración de un compresor y un tanque flash previo a la columna de separación, ya que la presión a la salida del reactor es de 10 atm y operar equipos a esa presión resulta riesgoso para los operadores, sin embargo, al momento de simular la operación la salida del tanque flash propone una presión superior a las 18 atm lo cual no hace viable el proceso.



Figura 16. Esquema de propuesta 3 de producción de 2-MTHF.

Conclusión

Se logró la obtención de diseños para la separación y purificación de dos productos de alto valor agregado, como lo son el ácido levulínico y el 2-MTHF. Para separación de la mezcla cuaternaria para la obtención del ácido levulínico, de los 5 posibles diseños propuestos solo fue factible satisfacer las restricciones de pureza en 3 de los diseños esto debido a que en los otros dos se presenta un azeotropo entre el furfural y el agua, siendo imposible romperlo mediante destilación convencional. Para poder obtener una mayor pureza es necesario utilizar un decantador, sin embargo, ese no era el objetivo del proyecto, pero pudiera explorarse en un futuro. En los diseños que se logró obtener las purezas en la columna donde se purifica el ácido fórmico la relación de reflujo es muy grande, esto pareciera no factible, pero es necesario visualizar que la cantidad de los flujos de los componentes impactan directamente en su relación de reflujo, y debido a que el ácido fórmico esta en una cantidad muy pequeña comparada con el furfural, ácido levulínico y agua, genera valores grandes de reflujo. De igual manera, al incrementarse la cantidad de reflujo, aumenta la carga térmica que impacta al costo total y al impacto ambiental, por lo que es necesario realizar un estudio de mayor profundidad para comparar el costo-beneficio de la purificación del ácido fórmico.

Por otro lado, se logro la implementación de la interfaz de optimización entre aspen plus y Excel para los 3 diseños propuestos para la purificación de ácido levulínico. Se colocó el calculo del costo total anual y el eco indicador 99, así como las variables de diseño de los diseños. Es importante mencionar, que el proceso de optimización no es sencillo y rápido. Por lo que el objetivo se restringió a la elaboración de la interfaz.

Por último, para la recuperación del 2-MTHF, se implementaron en el simulador aspen plus 3 diferentes propuestas. Sin dar buenos resultados el uso de la columna flash y el decantador, esto debido a que a las condiciones de la mezcla no se presentan dos fases. Sin embargo, mediante la manipulación de las variables de diseño del proceso convencional de destilación se logró aumentar la pureza de un 88% a un 94%. Por tanto, en este trabajo se realizó la propuesta exitosa de 4 procesos para la purificación de bio-productos, aportando con ello una pequeña contribución a los esfuerzos para la transición hacia procesos sostenibles y dentro de una economía circular.

Referencias

- [1] "Environmental analysis of the life cycle emissions of 2-methyl tetrahydrofuran solvent manufactured from renewable resources, *Journal of Environmental Science and Health*".
- [2] H. Alcocer-García, J. G. Segovia-Hernández, E. Sánchez-Ramírez, P. Tominac, and V. M. Zavala, "Coordinated markets for furfural and levulinic acid from residual biomass: A case study in Guanajuato, Mexico," *Comput Chem Eng*, vol. 156, p. 107568, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.compchemeng.2021.107568.
- [3] M. Antar, D. Lyu, M. Nazari, A. Shah, X. Zhou, and D. L. Smith, "Biomass for a sustainable bioeconomy: An overview of world biomass production and utilization," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 139, p. 110691, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.rser.2020.110691.
- [4] "Production of 2-Methyltetrahydrofuran (2-MTHF) from biomass-derived furfural via hydrogenation: Reusability of catalyst," 2013.
- [5] S. Kang, J. Fu, and G. Zhang, "From lignocellulosic biomass to levulinic acid: A review on acid-catalyzed hydrolysis," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 94. Elsevier Ltd, pp. 340–362, Oct. 01, 2018. doi: 10.1016/j.rser.2018.06.016.
- [6] J. A. ZUMÁRRAGA PECH, "EFECTO DE LOS PRETRATAMIENTOS HIDROTÉRMICOS EN LA COMPOSICIÓN QUÍMICA Y LA SACARIFICACIÓN DEL BAGAZO DE Agave tequilana," MÉRIDA, YUCATAN, Mar. 2012.
- [7] H. Alcocer-García, J. G. Segovia-Hernández, O. A. Prado-Rubio, E. Sánchez-Ramírez, and J. J. Quiroz-Ramírez, "Multi-objective optimization of intensified processes for the purification of levulinic acid involving economic and environmental objectives," *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 136, pp. 123–137, Feb. 2019, doi: 10.1016/j.cep.2019.01.008.
- [8] H. Hernández-Escoto and S. Hernández-Castro, "INTEGRACION DE ENERGIA EN SECUENCIAS DE DESTILACION PARA SEPARAR MEZCLAS CUATERNARIAS ENERGY INTEGRATION IN DISTILLATION SEQUENCES FOR THE SEPARATION OF QUATERNARY MIXTURES," 2006.
- [9] F. SEIBERT, "A METHOD OF RECOVERING LEVULINIC ACID," Mar. 2010.
- [10] A. Jiménez Gutiérrez, *Diseño de procesos en ingeniería química*, Reverté. España, 2003.
- [11] Birgit. Kamm, Patrick. Gruber, and Michael. Kamm, *Biorefineries - Industrial Processes and Products : Status Quo and Future Directions*. WILEY-VCH, 2005.
- [12] L. C. Nhen, N. V. D. Long, S. Kim, and M. Lee, "Design and Assessment of Hybrid Purification Processes through a Systematic Solvent Screening for the Production of Levulinic Acid from Lignocellulosic Biomass," *Ind Eng. Chem Res*, vol. 55, no. 18, pp. 5180–5189, May 2016, doi: 10.1021/acs.iecr.5b04519.
- [13] VIII. Henley E. J. y Seader J. D, *Aplicaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*, Reverté. España. 2003.
- [14] J. L. Solís Sánchez, E. S. Vázquez Silva, A. Enríquez Salmerón, J.C. Padilla Valtierra, M. Flores Juanto, D. Mejía Piceno & E. Sánchez Ramírez, E. *Aprovechamiento de residuos lignocelulósicos para la obtención de bio- productos de alto valor agregado*. JÓVENES EN LA CIENCIA, 16, 1–13. (2022)