

# Diseño y Optimización del Proceso para la producción de Ácido Levulínico

## Introducción

El ácido levulínico (AL) es considerado dentro de los doce principales productos químicos provenientes de biomasa en términos de potencial de mercado, por su gran número de aplicaciones. A pesar de su condición de producto químico especializado en un mercado relativamente pequeño de alto valor agregado (i.e. aproximadamente 1 millón libras/año a 4,00–6.00/lb) (Bozell et al. 2000), el ácido levulínico tiene un enorme potencial como materia prima económica para producir una gama de productos de importancia industrial como: reactivos quirales, materiales biológicamente activos, polihidroxicanoatos, polímeros, iniciadores de polimerización, compuestos anti-floculantes, productos personales, lubricantes, absorbentes, tintas, recubrimientos, electrónica, fotografía, baterías, síntesis de medicamentos e inhibidores de la corrosión, entre otros (Phillips and Armstrong 1993)

El AL se obtiene a partir de la hidrólisis ácida de biomasa lignocelulósica, reconocida como uno de los recursos renovables más abundantes, económicos y que puede ser precursora de diversos productos entre ellos el LA, Figura 1.

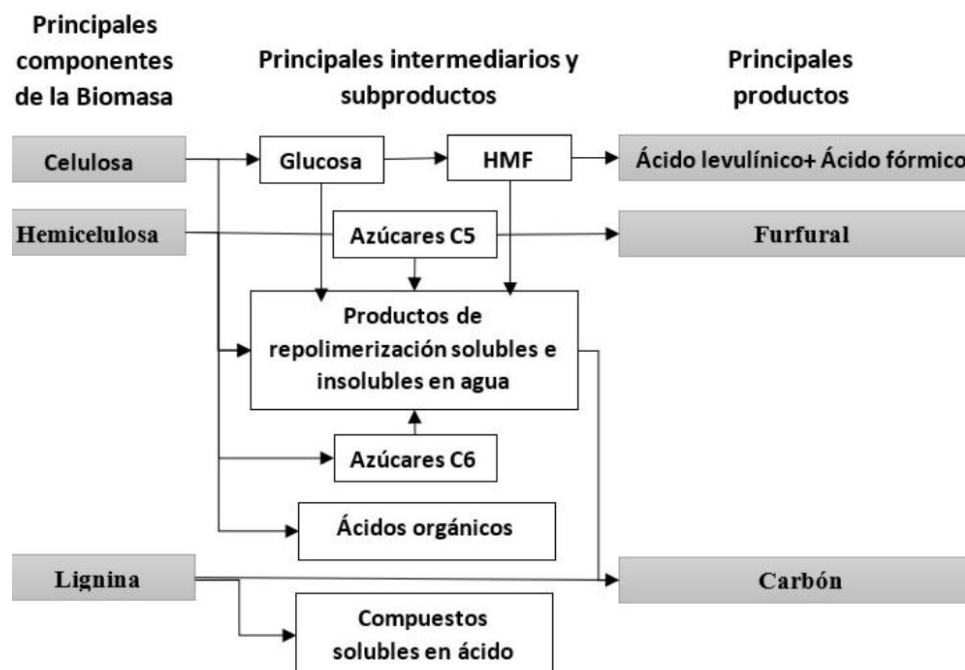


Fig. 1 Conversión esquemática de los principales constituyentes de la biomasa durante la conversión directa de lignocelulosa en ácido levulínico, (adaptada de Schmidt et al. (2017)).

La biomasa lignocelulósica está compuesta en su mayoría de celulosa, hemicelulosa y lignina. Para poder transformarla a LA mediante un hidrólisis ácida se debe partir de glucosa, por tanto, primero es necesario un pretratamiento de la biomasa que incluye una hidrólisis térmica para eliminar la hemicelulosa y una hidrólisis enzimática para eliminar la lignina,

Figura 2. La glucosa obtenida es sometida a una hidrólisis ácida y transformada en 5-hydroxymethylfurfural (MHF), que es el intermediario para llegar al LA. (Schmidt et al. 2017).

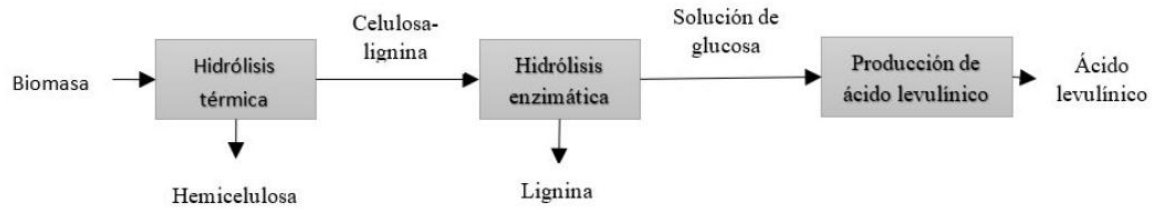


Figura 1-2: Diagrama de flujo esquemático del concepto de biorrefinería considerado para la producción de LA a partir de biomasa lignocelulósica, (adaptada de Schmidt et al. (2017)).

### Descripción del Problema

Si bien el proceso para la producción de Ácido Levulínico es bastante extenso, la parte medular del mismo proviene de la zona de reacción. Si la zona de producción primaria de AL está mal diseñada, probablemente el efluente generado no cumpla con los requerimientos de concentración de AL para generar un proceso global económicamente y ambientalmente factible, considerando que la comparación directa es con la producción del mismo a partir de fuentes no renovables.

Por lo tanto, el reactor o reactores asociados a la zona de reacción deben de ser diseñados con parámetros específicos que permitan maximizar la producción de los componentes deseados. Sin embargo, debe de cuidarse que no se esté infringiendo el rango de operación de un reactor que está tratando con material orgánico. La mezcla de estos escenarios genera un escenario interesante en la que el objetivo económico probablemente tenga un comportamiento antagonista en relación con la cantidad producida de compuestos deseados.

Actualmente los simuladores de procesos químicos son una herramienta altamente eficiente que permite encontrar y variar las condiciones de operación de las operaciones unitarias, por lo que para este proyecto se tiene contemplado el uso del software Aspen plus para la reproducción del reactor o reactores para la producción de ácido levulínico.

Con esto en mente, este proyecto intentará abordar la zona de la reacción para la producción de hydroxymethylfurfural y posteriormente ácido levulínico con el fin de obtener las condiciones de diseño y concentraciones deseadas para ser enviado posteriormente a la zona de purificación.

### Objetivos

- Diseñar un sistema de reactores que produzcan ácido levulínico
- Encontrar un rango de operación para las variables de diseño del reactor
- Maximizar la cantidad de ácido levulínico producido
- Evaluar el impacto económico y ambiental del proceso encontrado

## Plan de trabajo

Actividad	jun-2020				jul-20	
	22-26 junio	29-3 junio	6-10 julio	13-17 julio	20-24 julio	27-31 julio
Búsqueda bibliográfica	x	x	x	x	x	
Introducción al ambiente de Aspen Plus	x	x	x			
Implementación de cinéticas y/o rendimientos para distintas materias primas		x	x			
Identificación de grados de libertad en el proceso			x	x		
Modelado de ecuaciones de impacto económico y ambiental			x	x		
Proceso de Optimización			x	x	x	
Análisis de resultados y Escritura de reporte				x	x	x

## Resultados Esperados

Inicialmente se espera que el estudiante sea capaz de manejar hábilmente el simulador aspen plus, es decir, que sea capaz de reproducir diversos casos de estudio. Adicionalmente se espera que, una vez completado el trabajo, se hayan generado una alternativa de reacción que sea capaz de producir un efluente suficiente de ácido levulino, que sitúe este proceso un paso adelante en la comparación directa con el proceso a partir de fuentes no renovables. Finalmente se espera obtener un rango de operación de la zona de reacción teniendo como objetivo la disminución del impacto económico del proceso así como el ambiental.

## Referencias

Bozell, J. J., Moens, L., Elliott, D., Wang, Y., Neuenschwander, G., Fitzpatrick, S., Bilski, R. & Jarnefeld, J. (2000), 'Production of levulinic acid and use as a platform chemical for derived products', *Resources, conservation and recycling* **28**(3), 227-239.

Phillips, E. & Armstrong, W. P. (1993), 'Corrosion inhibitors'. US Patent 5,250,325.

Schmidt, L. M., Mthembu, L. D., Reddy, P., Deenadayalu, N., Kaltschmitt, M. & Smirnova, I. (2017), 'Levulinic acid production integrated into a sugarcane bagasse based biorefinery using thermal-enzymatic pretreatment', *Industrial Crops and Products* **99**(Supplement C), 172-178.

## **Responsable del proyecto**



---

Dr. Eduardo Sánchez Ramírez  
Departamento de Ing. Química  
732 00 06 ext. 1403