Universidad Nacional
SAN LUIS GONZAGA



Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional

Esta licencia permite a otras combinar, retocar, y crear a partir de su obra de forma no comercial, siempre y cuando den crédito y licencia a nuevas creaciones bajo los mismos términos.

http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL SAN LUIS GONZAGA

EVALUACIÓN DE ORIGINALIDAD

CONSTANCIA

El que subscribe, deja constancia que se ha realizado el análisis con el software de verificación de similitud al documento cuyo título es:
"DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES TERMODINÁMICAS Y DE FENOMENOLOGÍA PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL LACTATO DE ETILO (LE)"

Presentado por:

BACH. VALLE HUAMÁN, ELIA REGINA

Autor de Tesis del nivel de PREGRADO de la Facultad de INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA. El Resultado obtenido es 0% (PORCENTAJE DE SIMILITUD) por lo cual, se otorga el calificativo de: APROBADO, según Reglamento de Evaluación de la Originalidad.

Se adjunta al presente el reporte de evaluación con el software de verificación de originalidad.

Observaciones:

El porcentaje de similitud es menor del 20%, establecido como máximo por Reglamento de Evaluación de originalidad.

Ica, 02 de marzo de 2026

N° de Recibo: 20150620

UNIVERSIDAD NACIONAL SAN LUIS GONZAGA

Dr. FERNANDO EDUARDO CAMO LEGUA
DIRECTOR DE LA UNIDAD DE INVESTIGACIÓN
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA

|UNIVERSIDAD NACIONAL “SAN LUIS GONZAGA”
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA

“*Determinación de las condiciones termodinámicas y de fenomenología para la simulación del proceso de producción del lactato de etilo (LE)*”

LINEA DE INVESTIGACIÓN:
Ciencias naturales, ingeniería y tecnologías sostenibles

TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE INGENIERO QUÍMICO

AUTOR: Bach. VALLE HUAMÁN, Elia Regina

ASESOR: Dr. FERNANDO EDUARDO CANO LEGUA

Ica, Perú

2025

DEDICATORIA

El presente trabajo le dedico principalmente a Dios, por darme fuerza para llegar a este momento tan importante en mi formación profesional.

A mis padres, por su amor y sacrificio han sido el faro que ilumina mi camino. Cada sacrificio que hicieron por mí, cada palabra de aliento y por brindarme su apoyo. Sin ustedes este sueño no habría sido posible.

A mis hermanos, por ser mis cómplices en la vida, por cada risa compartida y cada consejo brindado han sido el impulso que necesitaba en los momentos de duda. Su confianza en mi me ha dado fuerza para seguir adelante.

A mis queridas primas Melany y Lucia y a toda mi familia, por ser pilares fundamentales en mi vida. Cada uno de ustedes ha tejido una red de amor y ha dejado una huella en mi corazón. Sus palabras de aliento y su fe en mi han sido un regalo invaluable que atesoro en mi corazón.

Y a todas las personas que se cruzaron mi camino, por sus enseñanzas y su amistad, por dejar una huella en mi vida. Este logro es un reflejo de la influencia positiva que han tenido en mi

AGRADECIMIENTOS

Gracias a Dios que me han dado fortalezas para seguir adelante y nunca rendirme.

A mi familia, principalmente a mis padres y hermanos por su apoyo constante, amor incondicional y por siempre creer en mí. Con su apoyo me impulsaron seguir adelante y nunca rendirme.

A mi Asesor el Dr. Fernando Cano Legua, que a sido fundamental. Por su apoyo y orientación en cada etapa de este proceso.

Y a todos aquellos que se han cruzado en mi vida que de una forma u otra me apoyaron a seguir adelante, y alcanzar este objetivo. Este logro es tanto mío como de ustedes.

Índice de Contenidos

		Pág.
Dedicatoria		**ii**
Agradecimientos		**iii**
Índice de Contenidos		**iv**
Índice de Tablas		**vi**
Índice de Figuras		**vii**
Resumen		**viii**
Abstract		**x**
I.	**INTRODUCCIÓN**	**01**
II.	**ESTRATEGIA METODOLÓGICA**	**04**
2.1.	Ácido láctico	04
2.2.	Etanol	05
2.3.	Lactato de etilo	06
2.4.	Datos experimentales para la producción de lactato de etilo	07
2.4.1.	Separación de etanol y agua mediante destilación extractiva	10
2.4.2.	Distribución de oligómeros en soluciones de ácido láctico	12
III.	**RESULTADOS**	**14**
3.1.	Metodología	14
3.2.	Recopilación de datos	15
3.2.1.	Datos de simulación	15
3.2.2.	Cinética de la reacción	16
3.3.	Diseño conceptual	19
3.3.1.	Sistema de destilación reactiva	20
3.3.2.	Sistema de separación	20
3.3.3.	Sistema de reciclaje	21
3.4.	Descripción del proceso	21

3.5. Modelo termodinámico utilizado 23
3.6. Evaluación del proceso 23
3.6.1. Análisis económico 23
3.6.2. Consumo energético 24
3.6.3. Emisiones de dióxido de carbono 25

IV. DISCUSIÓN 26

4.1. Utilización de la materia prima 26
4.2. Resultados simulados de la producción de lactato de etilo 27
4.3. Análisis económico 31
4.4. Consumo de energía 33
4.5. Evaluación de emisiones de dióxido de carbono 34

V. CONCLUSIONES 36

VI. RECOMENDACIONES 38

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS 39

VIII. ANEXOS 40

Índice de Tablas

Tabla 1 Propiedades físicas y químicas del lactato de etilo 6
Tabla 2 Comparación de la producción de lactato de etilo entre la esterificación del ácido láctico con etanol frente a la de ácido sulfúrico y Amberlyst 15 [7] 7
Tabla 3 Datos experimentales de la formación de lactato de etilo 9
Tabla 4 Configuraciones de simulación de la producción de lactato de etilo a escala comercial [8] 10
Tabla 5 Comparación de ventajas del método de recuperación de etanol. [10] 11
Tabla 6 Configuración de columnas para la recuperación de etanol [11]. 12
Tabla 7 Composición del ácido láctico con acidez superficial total por titulación [12]. 13
Tabla 8 Concentraciones superficiales de ácido láctico al 50 y 85 % en peso 16
Tabla 9 Parámetros del modelo cinético 17
Tabla 10 Comparación de valores experimentales y predicción del modelo para la esterificación de ácido láctico al 20, 50 y 88 % en peso con etanol 18
Tabla 11 Costos para la producción de lactato de etilo 24
Tabla 12 Precio de los servicios 24
Tabla 13 Factores de emisión de dióxido de carbono 25
Tabla 14 Comparación de la conversión y el rendimiento de una torre destiladora reactiva y un reactor de equilibrio. 26
Tabla 15 Resultados producción lactato de etilo (LE) del Escenario 3. 28
Tabla 16 Resultados producción LE del Escenario 3. 29
Tabla 17 Resultados producción LE del Escenario 3. 30
Tabla 18 Resultados producción LE del Escenario 3. 31
Tabla 19 Resultados del flujo de producción de lactato de etilo del Escenario 3. 32
Tabla 20 Resumen del consumo energético 34
Tabla 21 Emisiones equivalentes de dióxido de carbono 35
Tabla 22 Conversión y rendimiento en la esterificación de ácido láctico con etanol mediante una torre destiladora reactiva 42

Índice de Figuras

Fig. 1 Ciclo de vida del lactato de etilo 1

Fig. 2 Sustancia química producida a partir del ácido láctico. 4

Fig. 3 Ejemplo de productos químicos producidos a partir de etanol 5

Fig. 4 Diagrama de una torre destiladora reactiva [9] 8

Fig. 5 Diagrama binario x-y de la mezcla de etanol y agua utilizando el modelo NRTL. 10

Fig. 6 Rutas de la metodología de investigación 14

Fig. 7 Diagrama de flujo de bloques de la producción de lactato de etilo mediante esterificación de etanol y ácido láctico. 19

Fig. 8 Diagrama de flujo del proceso de producción de lactato de etilo mediante esterificación de etanol y ácido láctico para los escenarios 1 y 3. 21

Fig. 9 Diagrama de flujo del proceso de producción de lactato de etilo mediante esterificación de etanol y ácido láctico para el escenario 2. 23

Fig. 10 Rutas de metodología de la investigación 33

RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo fue el desarrollo de un nuevo proceso eficiente para producir el disolvente verde lactato de etilo(LE) por esterificación etanol-ácido láctico mediante tecnologías híbridas de reacción/separación basadas en reactores de lecho móvil simulados y procesos de pervaporación con membrana.

Para lograr este objetivo, se abordaron los siguientes temas: Adquisición de datos básicos: La resina ácida Amberlyst 15-wet se evaluó como catalizador para la esterificación y adsorbente selectivo para agua.

Se midieron datos de equilibrio y cinéticos en el rango de temperatura de 50-90 °C, que se utilizaron para obtener la const. de equilibrio y la ley cinética por la temperatura, basadas en las actividades líquidas descritas por el modelo UNIQUAC.

También se obtuvieron datos de adsorción y se ajustaron a una isoterma de Langmuir multicomponente, asumiendo una capacidad de monocapa constante en términos de volumen para todas las especies, reduciendo los parámetros ajustables de 8 a 5 para cada temperatura.

Se evaluaron las membranas comerciales hidrofílicas para la deshidratación de etanol, ácido láctico y lactato de etilo mediante pervaporación. Se determinaron las permeancias de todas las especies en función de la composición y la temperatura en un rango de 48-72 °C.

Intensificación del proceso: Se desarrollaron modelos matemáticos para reactores cromatográficos (de lecho fijo y de lecho móvil simulado, SMBR), considerando las resistencias de transferencia de masa externas e internas y las variaciones de velocidad debidas al cambio de propiedades de mezcla multicomponente.

Estos modelos se validaron mediante datos experimentales. El modelo del reactor de membrana de pervaporación (PVMR) también considera la permeación a través de la membrana, los efectos de la concentración y la polarización de la temperatura, y la operación no isotérmica.

Se realizó una evaluación teórica del comportamiento de la unidad SMBR para analizar el efecto de la configuración del SMBR, la composición de la alimentación y el tiempo de conmutación en las regiones reactivas/de separación y/o en el rendimiento del proceso en los puntos de operación óptimos.

Se evaluó el rendimiento del PVMR en condiciones isotérmicas y no isotérmicas, y se examinaron las condiciones adecuadas para maximizar la conversión de ácido láctico y la pureza del lactato de etilo.

Finalmente, se desarrolló y presentó una nueva tecnología para su registro de patente: el reactor de membrana de lecho móvil simulado (PermSMBR), que integra membranas selectivas de permeabilidad en las columnas del SMBR.

Palabras clave: Esterificación, lactato de etilo, ácido láctico, destilación reactiva.

ABSTRACT

The main objective of this work was to develop a new, efficient process for producing the green solvent ethyl lactate through the esterification reaction between ethanol and lactic acid, utilizing hybrid reaction/separation technologies based on simulated moving bed reactors and pervaporation membrane processes.

To achieve this goal, the following topics were addressed: Fundamental data acquisition: The ion exchange resin, Amberlyst 15-wet, was evaluated both as a catalyst for the esterification reaction and as a water-selective adsorbent.

Reaction kinetic and equilibrium data were measured over the temperature range of 50°C–90°C and used to determine the equilibrium constant and the reaction kinetic law as a function of temperature, based on activities described by the UNIQUAC model.

Adsorption data were also measured at 20°C and 50°C and fitted to a multicomponent Langmuir isotherm, assuming the same monolayer volumetric capacity for all species, reducing the number of fitting parameters from 8 to 5 for each temperature.

Commercial hydrophilic membranes from Pervatech were evaluated for the dehydration of ethanol, lactic acid, and ethyl lactate by pervaporation. The permeances of all species were determined as a function of composition and temperature in the range of 48°C–72°C.

Process intensification: Mathematical models, considering internal and external resistances to mass transfer and variable speed due to changing properties of the multicomponent mixture, were developed for chromatographic reactors—fixed bed and simulated moving bed reactors (SMBR)—and validated using experimental data.

The mathematical model of the pervaporation membrane reactor (PVMR) additionally considers permeation through the membrane, concentration and temperature polarization effects, and non-isothermal operation.

A theoretical evaluation of the SMBR unit's behavior was performed to analyze the effect of configuration, feed composition, and switching time on the

separation/reaction regions and/or on process performance at optimal operating points.

The PVMR's performance was evaluated for isothermal and non-isothermal operation, and appropriate conditions were determined to maximize both lactic acid conversion and ethyl lactate purity. Finally, a new technology was developed and submitted for patent: the simulated moving bed membrane reactor (PermSMBR), which integrates selective membranes within the SMBR columns.

Keywords: Ethyl lactate, Lactic acid, Esterification, Reactive distillation.

I. INTRODUCCIÓN

El petróleo ("oro negro") está en el centro de los problemas económicos y políticos actuales. Las reservas tradicionales de petróleo están en declive; además, la regulación ambiental es cada vez más estricta, lo que representa un gran desafío para el diseño e implementación de productos y procesos ecológicos.

Los solventes ecológicos, que se producen a partir del procesamiento de cultivos agrícolas, se desarrollaron como una alternativa más ecológica a los solventes petroquímicos.

Los solventes de ésteres de lactato son 100% biodegradables, fáciles de reciclar, no corrosivos, no cancerígenos y no dañan la capa de ozono. Los ésteres de lactato han encontrado aplicaciones industriales en recubrimientos especiales, tintas, limpiadores y usos de limpieza directos.

El lactato de etilo es un solvente ecológico derivado de materias primas naturales y es tan benigno que la Administración de Alimentos y Medicamentos de EE. UU. (FDA) aprobó su uso en productos alimenticios.

El lactato de etilo podría sustituir a diversos disolventes halogenados y tóxicos perjudiciales para el medio ambiente, como los clorofluorocarbonos que dañan la capa de ozono, el cloruro de metileno cancerígeno, los éteres de etilenglicol y el cloroformo, ambos tóxicos. En la Figura 1 se muestra el ciclo de vida LE.

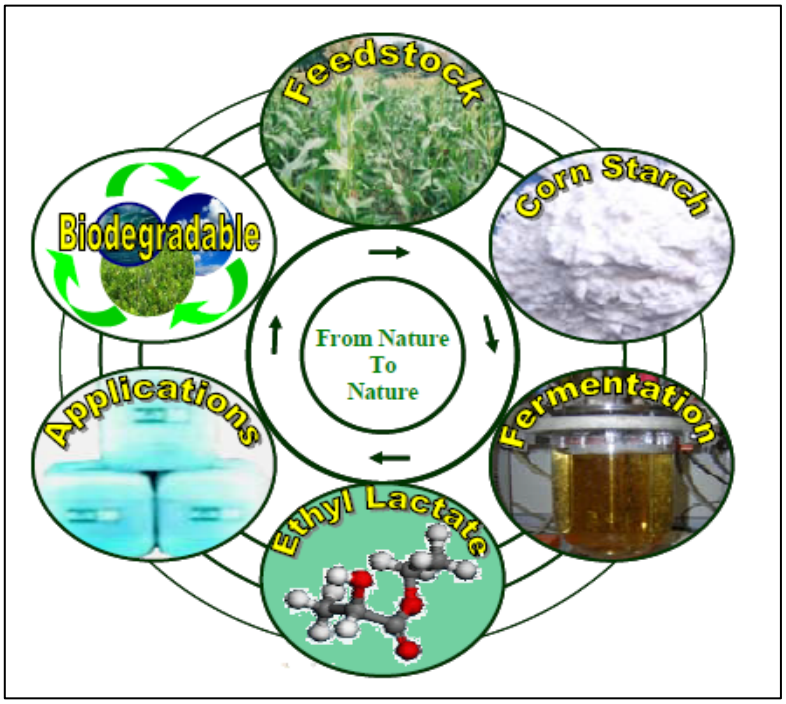

Fig. 1 Ciclo de vida LE

El LE se produce mediante la esterificación del ácido láctico con etanol mediante una reacción reversible, con agua como subproducto. Tradicionalmente, el LE se sintetiza en un reactor, seguido de unidades de separación para recuperarlo, eliminar el subproducto (agua) y reciclar los reactivos no convertidos al reactor; sin embargo, esto supone un coste elevado.

Uno de los objetivos de este trabajo es estudiar equipos y técnicas que ofrezcan procesos sostenibles, más compactos, energéticamente eficientes y respetuosos con el medio ambiente para la producción de LE.

La intensificación de procesos, que consiste en integrar los procesos de reacción y separación en un único dispositivo, ofrece la solución de ingeniería más viable para la síntesis sostenible de LE, ya que al menos un producto se elimina del medio de reacción para reducir el reactivo limitante.

Desde esta perspectiva, se considerarán reactores cromatográficos continuos y reactores de membrana para producir LE: el Reactor de Lecho Móvil Simulado (SMBR) y el Reactor de Membrana de Pervaporación (PVMR), respectivamente.

El SMBR es una tecnología competitiva para sistemas que implican reacciones controladas por equilibrio catalizadas por resinas de intercambio iónico, que además son adsorbentes selectivos del agua (el subproducto formado en la síntesis de LE), dado que los productos se forman, se separan y se eliminan simultáneamente del medio de reacción.

La tecnología PVMR es una alternativa limpia y económica a los procesos convencionales, ya que permite modificar el equilibrio mediante la eliminación continua de agua a través de una membrana selectiva, lo que permite reducir costes y aumentar la pureza del producto.

Combinando las ventajas de ambas tecnologías, finalmente se desarrollará una nueva tecnología híbrida, el Reactor de Membrana de Lecho Móvil Simulado (SMBMembR o PermSMBR) que combina en un único dispositivo un reactor con dos técnicas de separación diferentes: cromatografía continua contracorriente (SMB) con membrana permeable selectiva (Pervaporación o Permeación).

Los disolventes son productos químicos más utilizados en la industria química. Se pueden clasificar en dos tipos: biodisolventes y disolventes petroquímicos, según materias primas utilizadas para su producción.

Los biodisolventes o disolventes verdes, producidos a partir de cultivos agrícolas, son más respetuosos con el medio ambiente que los disolventes petroquímicos. Por lo tanto, los disolventes verdes representan una nueva alternativa sin efectos graves sobre el medio ambiente [1].

El LE es un disolvente verde derivado de la esterificación del etanol y el ácido láctico. Es fácilmente biodegradable y tiene diversas aplicaciones, como agente de limpieza, aditivo alimentario y aromatizante.

Su principal uso es como disolvente en la industria electrónica y puede sustituir a disolventes peligrosos como el percloroetileno, los disolventes halogenados, el cloruro de metileno, el cloroformo y los éteres de etilglicol en una proporción 1:1 [2].

El tamaño del mercado global del LE está siendo analizado y pronosticado para el período comprendido entre 2021 y 2026 por la industria de la investigación química. Los ingresos del mercado global de LE en 2022 fueron de 86 millones de dólares.

Se espera que el mercado alcance un tamaño de 107,5 millones de dólares para 2026, con una tasa de crecimiento anual promedio del 3,2 % durante el período de pronóstico 2023-2028 [3].

Esto representa una oportunidad prometedora para invertir en el mercado como medio para reducir la dependencia de los disolventes derivados del petróleo crudo. Existen muchos tipos de procesos de esterificación, como la membrana de pervaporación, la destilación reactiva, los reactores cromatográficos, etc.

El proceso de producción más popular es el proceso de destilación reactiva. La destilación reactiva consiste en la separación y la reacción en una sola operación. La torre destiladora reactiva se divide en tres secciones: una sección de destilación no reactiva, una sección reactiva y una sección de enriquecimiento no reactiva.

La principal reacción química para producir LE por esterificación de etano-ácido láctico ocurre sobre un catalizador de resina de intercambio catiónico Amberlyst-15 empaquetado en la sección reactiva [4] .

II. ESTRATEGIA METODOLÓGICA

2.1. Ácido láctico

El ácido láctico puede producirse mediante síntesis desde una reacción química o por procesos de fermentación microbiana.

Generalmente, las bacterias lácticas utilizadas en el proceso de fermentación láctica se reconocen como microorganismos seguros, utilizados para la conservación de alimentos y diversos productos alimenticios fermentados. Por lo tanto, el ácido láctico resultante de la fermentación es seguro para su uso en diversos campos [5] .

Actualmente, el ácido láctico de origen biológico se utiliza como materia prima para la producción de nuevos productos químicos. Las rutas químicas del ácido láctico de origen biológico se muestran en la Figura 2.

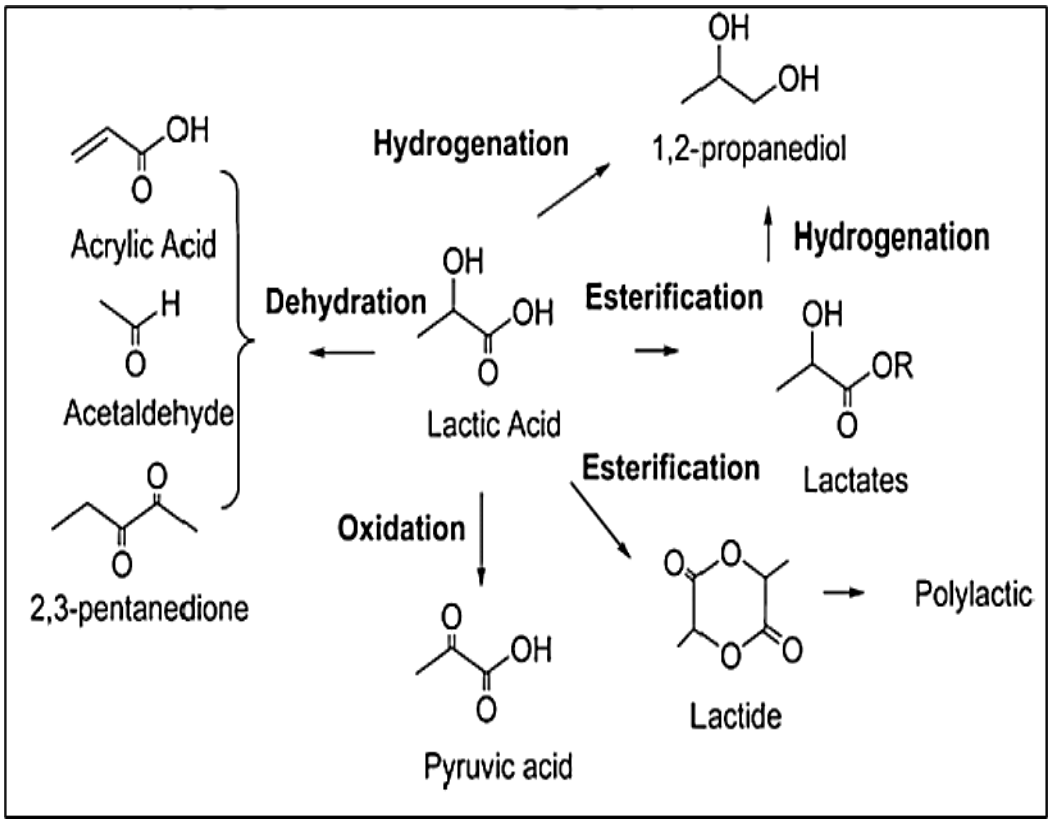

Fig. 2 Sustancia química producida a partir del ácido láctico.

El ácido láctico en solución acuosa presenta un comportamiento conocido como oligomerización de sus dos moléculas. Cuando la concentración de ácido láctico supera el 30 % en peso, el ácido láctico monomérico experimenta la reacción de oligomerización, transformándose en ácidos oligoméricos.

Por lo tanto, el contenido de ácido láctico necesario para el proceso de esterificación se reduce debido a la presencia de los ácidos oligoméricos.

2.2. Etanol

El etanol, uno de los componentes clave de la industria química, puede derivarse de materiales de biomasa como madera, cultivos, azúcar, etc. El etanol se puede utilizar como combustible en el transporte, lo que ayuda a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero en comparación con el petróleo.

El etanol no solo se utiliza como combustible, sino también para producir productos químicos, como se ilustra en la Figura 3.

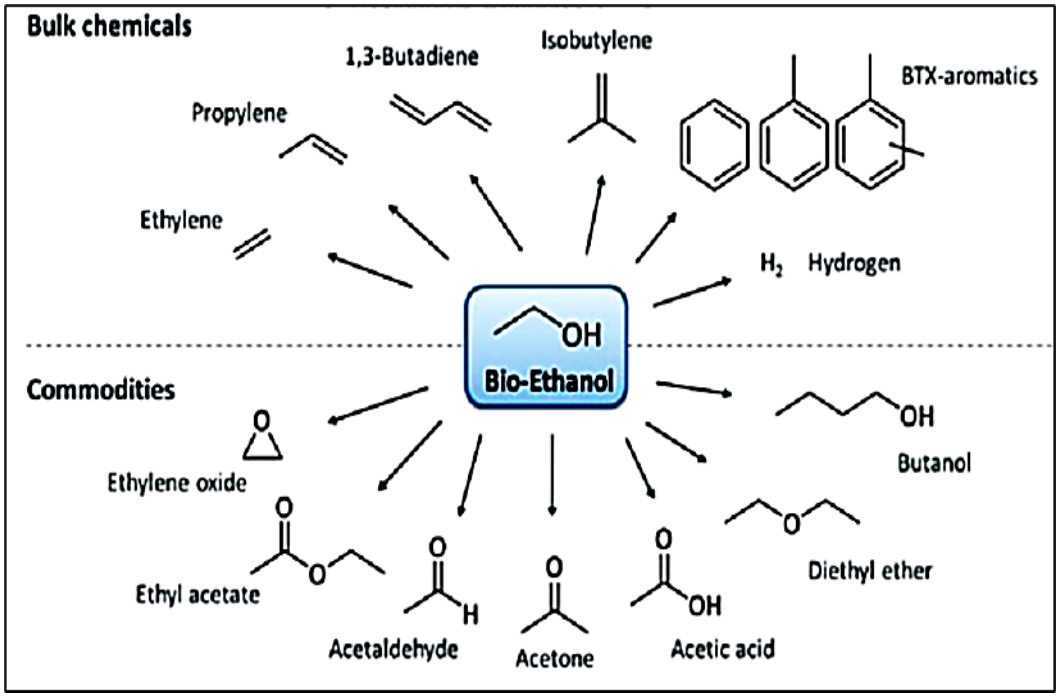

Fig. 3 Ejemplo de productos químicos producidos a partir de etanol

La Figura 3 muestra la versatilidad de la transformación del etanol, una sustancia química fundamental, en productos valiosos como el etileno, el acetaldehído, el acetato de etilo, etc.

2.3. Lactato de etilo (LE)

El disolvente es uno de los componentes clave en la industria química. El LE puede sustituir hasta el 80 % del disolvente utilizado actualmente. El LE se presenta como un líquido ligeramente amarillento con un olor característico.

Las propiedades básicas del LE se muestran en la tabla 1 [6].

Tabla 1 Propiedades físicas y químicas del LE

Propiedades	**Unidad**	**Valor**
Apariencia	-	Descolorido
Olor	-	Característica
Punto de fusión	°C	-26
Punto de ebullición	°C	154
Densidad a 25 °C	g mL^{-1}	1.031
Índice de refracción	-	1.4124
Punto de inflamabilidad	°C	54.6±6.4
Solubilidad	-	Miscible con agua

Tanto el ácido láctico como el etanol pueden sintetizarse a partir de la fermentación de biomasa. La esterificación etanol-ácido láctico es uno de los métodos convencionales para producir LE.

Existen catalizadores ácidos bifásicos para esterificar ácido láctico-etanol: líquido y sólido. Los catalizadores ácidos líquidos y sólidos más comunes son el ácido sulfúrico y Amberlyst 15, respectivamente.

El catalizador ácido líquido es el más común para esterificar ácido láctico-etanol.

Tabla 2 Comparación de producir LE entre la esterificación ácido láctico-etanol frente a la de ácido sulfúrico y Amberlyst 15 *[7]*

Lista	**Ácido sulfúrico (catalizador líquido)**	**Amberlyst-15 (catalizador sólido)**
No se ve afectado por el contenido de agua en la materia prima	SI	SI
Esterificación simultánea	SI	SI
Fácil separación del catalizador del producto	NO	SI
Posibilidad de reutilizar y regenerar el catalizador	NO	SI
No es necesario neutralizar el catalizador	NO	SI
No es necesaria una etapa de eliminación del catalizador	NO	SI
Respetuoso con el medio ambiente	NO	SI
Reduce la corrosión de las tuberías	NO	SI

Como se muestra en la Tabla 2, la producción de LE mediante la esterificación de ácido láctico con etanol sobre el catalizador ácido Amberlyst-15 puede actuar como catalizador, además de como catalizador de ácido sulfúrico.

Además, el catalizador ácido Amberlyst-15 presenta ventajas sobre el catalizador de ácido sulfúrico en cuanto a su fácil separación, reutilización y respeto al medio ambiente.

2.4. Datos experimentales para la producción de LE

Miller et al. (2010) [8] estudiaron la producción de ésteres de ácidos orgánicos utilizando torres destiladoras reactivas con catalizador ácido.

La torre destiladora reactiva se diferencia de la torre destiladora normal en que no solo separa la sustancia, sino que también participa en la Rx.

Como se muestra en la Figura 3, la torre destiladora reactiva tiene tres secciones: rectificadora, reactiva y de destilación [9].

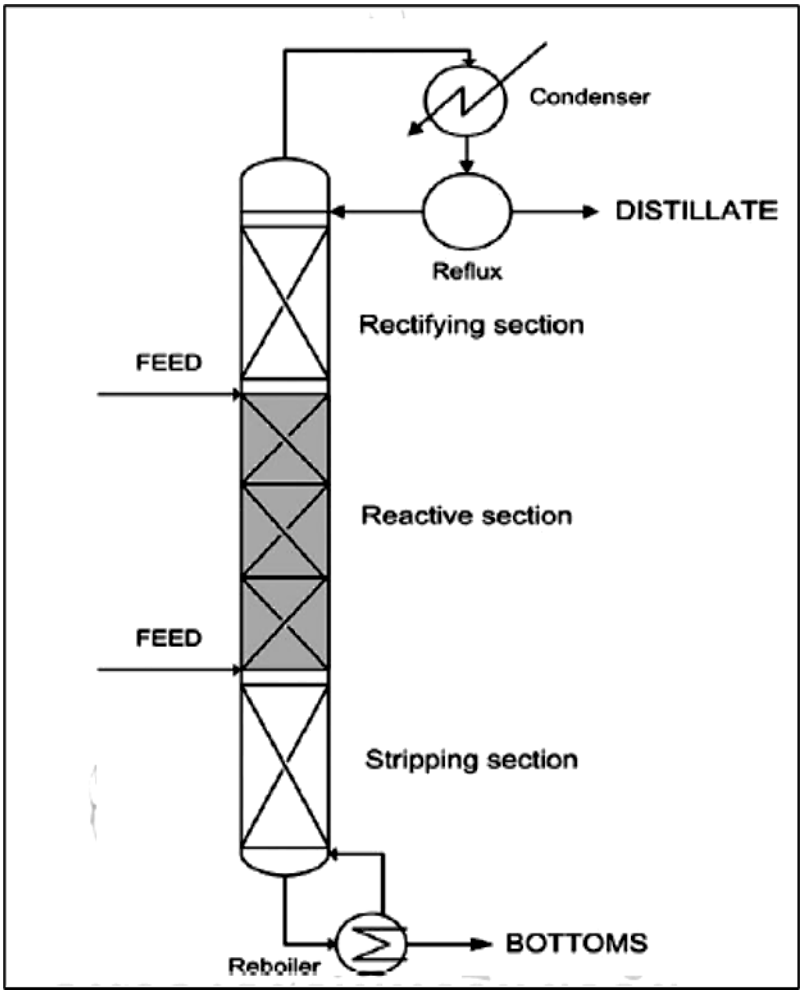

Fig. 4 Diagrama torre destiladora reactiva *[9]*

Producir LE mediante la esterificación de ácido láctico-etanol fue objeto de un estudio realizado por Miller et al. (2010) [8] con una configuración piloto.

Las corrientes de alimentación de solución de ácido láctico a temperatura ambiente y etanol absoluto se introdujeron en la parte superior e inferior de la columna, respectivamente.

La relación de reflujo se fijó en cero. La zona reactiva, ubicada entre los puntos de alimentación superior e inferior, fue donde se formó el LE.

El etanol utilizado en el experimento fue de pureza absoluta. Los datos experimentales sobre la formación de LE se presentan en la Tabla 3.

Tabla 3 Datos experimentales de la formación de LE

Escenario	Ex.	Comp. del alimento para LA	Temp. de alimentación EtOH	EtOH:LA	Conv. LA	Yield
		Wt %	°C	-	%	%
1	33	50	25	7.14	56.84	67.33
2	36	50	85	7.14	94.82	71.87
3	19	85	25	3.60	95.52	112.44
4	23	85	85	3.60	94.93	96.53

LA = Ácido láctico

EtOH = Etanol

EtLa = Lactato de etilo

L = Líquido reciclado a la columna

D = Producto destilado

Comp. = Composición

Conv. = Conversión

Temp. = Temperatura

Yield = Rendimiento de LE basado en el ácido láctico monómero en la alimentación

C = Oligómeros de ácido láctico y ésteres etílicos

Además, los resultados experimentales se utilizaron como datos de entrada para la simulación con el software Aspen Plus. Los experimentos 33, 36 y 19 se consideran Escenarios 1, 2 y 3, respectivamente.

La simulación se estableció con base en una producción de LE a escala comercial de 25 millones de libras por año, utilizando el parámetro de simulación del experimento. La altura de un plato teórico equivalente (HETP) de 0,6 metros se utilizó como altura teórica de la columna de relleno.

Se alimentó etanol puro en la reacción. Se utilizó ácido láctico monómero como reactivo limitante [8].

Las configuraciones y los resultados de la simulación a escala comercial se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4 Configuraciones de simulación para producir LE a escala comercial *[8]*

Configuración de la Columna	Unidad	Producción de LE (etanol + ácido láctico)
Numero de etapas	-	40
Ubicación Alimentación	-	2 y 35
Etapas reactivas	-	7 a 35
Relación de Reflujo	-	0.001
Relación de ebullición	-	5
Altura de la columna	Metro	22
Diámetro de Columna	Metro	1

2.4.1. Separación etanol-agua mediante destilación extractiva

Por la alta proporción de etanol a ácido láctico en Tabla 3, esto puede resultar en un exceso de etanol remanente en producir LE.

Por lo tanto, la recuperación del residuo de etanol fue importante para la reducción de costos. El etanol sobrante de la esterificación se mezcló con agua.

Generalmente, se utiliza primero una torre de destilación para separar el etanol y el agua. La pureza del etanol de la torre destiladora estuvo limitada por el punto de azeótropo del etanol y el agua.

La mezcla etanol-agua forma un azeótropo de ebullición mínima de 89,4 mol % de etanol.

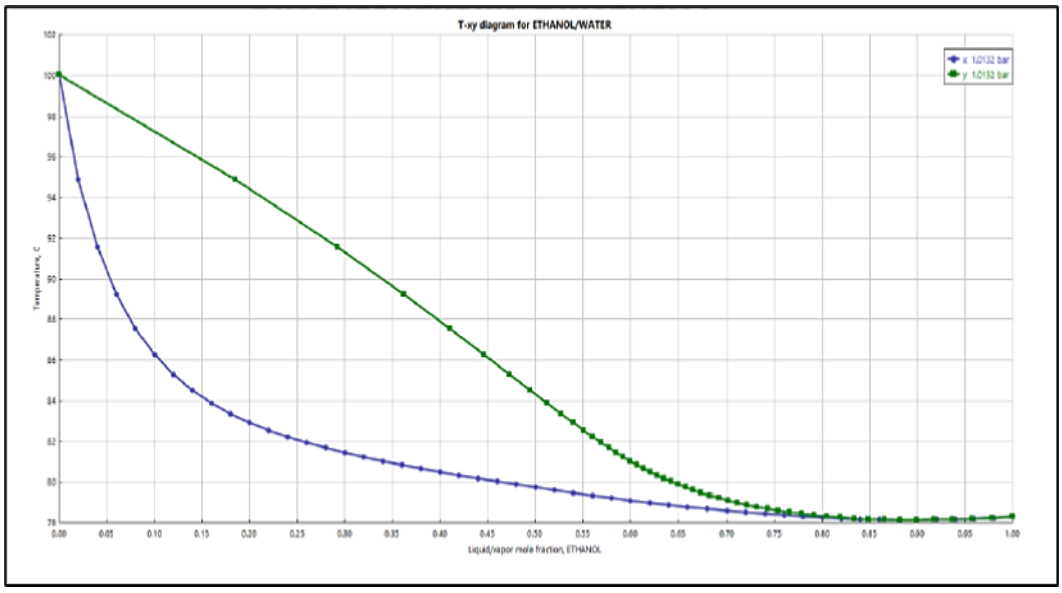

Fig. 5 Diagrama binario x-y del etanol-agua utilizando el modelo NRTL.

Por lo tanto, el etanol destilado aún no era lo suficientemente puro como para reciclarlo. El siguiente paso en la purificación del etanol se puede realizar principalmente mediante tres métodos populares: destilación extractiva, adsorción por oscilación de presión y pervaporación con membrana [10].

De la comparación que se muestra en la Tabla 5, los métodos de adsorción por oscilación de presión y pervaporación con membrana son más rentables y energéticamente eficientes.

Tabla 5 Comparación de ventajas del método de recuperación de etanol. *[10]*

Comparación de ventajas	**Destilación extractiva**	**Adsorción por oscilación de presión**	**Membrana de pervaporación**
Alta capacidad de separación	✓	×	×
Simplicidad de operación	✓	×	×
Fácil de mantener	✓	×	×
Baja sensibilidad	✓	×	×
Requisito de mano de obra experta	×	✓	✓
Eficiencia energética	×	✓	✓
Rentabilidfad	×	✓	✓
Escala industrial	✓	×	×

Sin embargo, se han utilizado favorablemente para la recuperación de etanol a escala de laboratorio. Por lo tanto, a escala industrial, la purificación del etanol se realiza principalmente mediante destilación extractiva.

Guangzhong Li y Peng Bai [11] estudiaron la nueva estrategia operativa de destilación extractiva para separar el etanol y el agua tras la destilación en el punto azeotrópico. Utilizaron etilenglicol, disolvente de una torre destiladora extractiva típica, para deshidratar el etanol.

Esta nueva estrategia operativa consta de dos columnas principales (una de destilación extractiva y otra de recuperación de disolvente), y una columna opcional para purificar el agua del destilado de la columna de disolvente, con el fin de reducir las emisiones de residuos.

La concentración de etanol en el destilado extractivo alcanza la especificación de composición del 99,95 % molar [11].

Las configuraciones de la torre destiladora extractiva se muestran en la Tabla 6.

Tabla 6 Configuración de columnas para la recuperación de etanol *[11]*.

Parámetro	**Unidad**	**Columna extractora**	**Columna recuperadora**	**Columna concentradora**
Número de etapas	-	25	12	25
Etapa de Alimentación	-	22	6	16
Etapa de alimentación del solvente	-	7		
Relación de reflujo	-	0.1	0.5	3
Condensador	-	Total	Total	Total
Presión de la etapa superior	atm	1	1	1
Relación disolvente/mol de alimentación	-	1		

2.4.2. Distribución de oligómeros en soluciones de ácido láctico

Este ítem ampliará información sobre las materias primas. El ácido láctico utilizado en la reacción de esterificación con etanol para producir LE es ácido láctico monomérico.

Sin embargo, la solución de ácido láctico no solo contiene ácido láctico monomérico, sino también ácido láctico dímero, trímero y tetrámero, denominados colectivamente oligómeros de ácido láctico.

La proporción de oligómero de ácido láctico es directamente proporcional a la concentración de la solución. El contenido de ácido láctico de cada concentración se puede consultar en la Tabla 7.

El porcentaje en peso de ácido superficial se indica como el peso total del monómero dividido entre el peso total de la solución.

En este trabajo, se seleccionaron las concentraciones de ácido superficial 50 y 85 para la producción de LE mediante la esterificación de ácido láctico y etanol [12].

Tabla 7 Composición del ácido láctico con acidez superficial total por titulación *[12]*.

Peso superficial total % LA%		**Análisis de HPLC (%EMLA)**					
Valoración	**HPLC**	**LA_1**	**LA_2**	**LA_3**	**LA_4**	**LA_5**	**LA_6**
12.24	10.81	99.63	0.37	0.00	0.00	0.00	0.00
24.36	26.88	96.31	3.59	0.10	0.00	0.00	0.00
44.47	47.62	94.74	5.06	0.20	0.00	0.00	0.00
53.43	51.25	94.53	5.28	0.19	0.00	0.00	0.00
59.59	62.02	89.95	9.33	0.72	0.00	0.00	0.00
70.60	71.93	84.61	13.58	1.65	0.16	0.00	0.00
81.46	81.90	75.66	19.49	3.88	0.69	0.28	0.00
87.13	89.62	65.92	25.05	6.90	1.63	0.49	0.00
88.06	89.63	66.85	24.09	6.87	1.72	0.48	0.00
96.75	96.42	54.42	28.56	11.48	3.84	1.38	0.32

%EMLA = Porcentaje de ácido láctico monómero equivalente en base libre de agua.

III. RESULTADOS

3.1. Metodología

Se describe en detalle la metodología de investigación para la simulación y el análisis económico de la producción de LE mediante la esterificación de etanol y ácido láctico.

El proceso consta de tres partes principales: recopilación de datos, simulación del proceso y análisis económico del proceso.

En el paso 1, se recopilarán datos sobre las condiciones de operación, las operaciones unitarias, las reacciones y el consumo de alimento.

En el paso 2, la simulación del proceso utiliza un programa para simular cada escenario del proceso de producción.

Finalmente, se realizará la comparación del proceso de producción en cada escenario utilizando diversas herramientas de evaluación económica, considerando factores como el consumo de energía y el impacto ambiental, para evaluar la eficiencia general del proceso de producción.

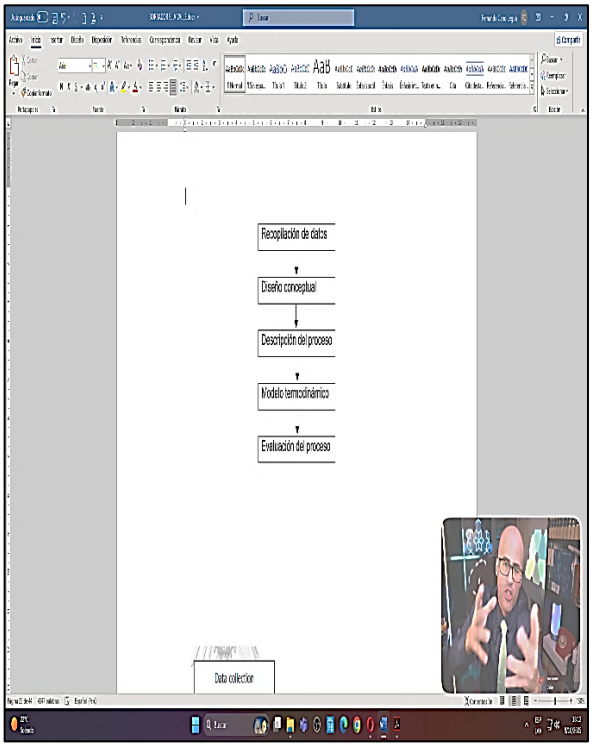

Fig. 6 Rutas de la metodología de investigación

3.2. Recopilación de datos

El proceso de recopilación de datos se segmentó en dos categorías distintas: datos de simulación y cinética de reacción.

3.2.1. Datos de simulación

La producción de LE mediante la esterificación de ácido láctico con etanol fue objeto de un estudio realizado por Miller et al. (2010) [8] utilizando una configuración a escala piloto.

Las corrientes de alimentación de solución de ácido láctico a temperatura ambiente y etanol absoluto se introdujeron en la parte superior e inferior de la columna, respectivamente. La relación de reflujo se fijó en cero.

La zona reactiva, ubicada entre los puntos de alimentación superior e inferior, fue donde se formó el LE. El etanol utilizado en el experimento fue de pureza absoluta.

Los datos experimentales para la formación de LE se presentan en la Tabla 3 [8]. Además de los resultados experimentales, estos se utilizaron como datos de entrada para la simulación mediante el software AspenPlus.

Los experimentos 33, 36, 19 y 23 se consideran Escenarios 1, 2, 3 y 4, respectivamente. La simulación se basó en una producción de LE a escala comercial de 25 millones de libras por año, utilizando los parámetros obtenidos del experimento.

Se empleó la altura de un plato teórico equivalente (HETP) de 0,6 metros como la altura teórica de la columna de relleno. Se utilizó etanol absoluto como reactivo de alimentación.

El reactivo limitante fue ácido láctico monómero. La configuración de la simulación se presenta en la Tabla 4 [8]. La reacción de esterificación entre etanol y ácido láctico para producir LE utiliza ácido láctico monómero; sin embargo, la solución de ácido láctico utilizada en la reacción no se limita a la forma monomérica, sino que también incluye formas diméricas (L2), triméricas (L3) y tetrámeras (L4), denominadas colectivamente como oligómeros de ácido láctico.

Debido a la pequeña cantidad de L3, L4, L5 y L6 y a las limitaciones de los componentes químicos en el programa de simulación, se combinaron en L2 para facilitar la simulación. La composición del ácido láctico se presenta en la Tabla 8 [12].

Tabla 8 Concentraciones superficiales de ácido láctico al 50 y 85 % en peso

Superficial wt.% LA	Superficial wt.% H_2O	Composición porcentual en peso real		
		H_2O	L_1	L_2
50	50	50.4	46.3	3.30
85	15	17.5	62.2	20.3

3.2.2. Cinética de la reacción

Normalmente, el LE se produce mediante la reacción de esterificación del etanol y el monómero de ácido láctico (L1). La reacción de esterificación catalítica se presenta en la ecuación 1.

Reacción principal:

$$L_1 + EtOH \rightleftharpoons L1E + H_2O \qquad (1)$$

El ácido láctico en solución acuosa exhibe un comportamiento conocido como oligomerización o autoesterificación de las dos moléculas de ácido láctico. Esta reacción aumenta con el aumento de la concentración de ácido láctico.

El ácido láctico monómero experimenta una reacción de oligomerización, lo que resulta en la formación de ácidos oligoméricos [12].

Como resultado, la cantidad de ácido láctico requerida para el proceso de esterificación se reduce debido a la presencia de ácidos oligoméricos. Las vías de reacción de oligomerización se representan en las ecuaciones 2 y 3, mientras que la esterificación de oligómeros se describe en las ecuaciones 4 y 5.

Formación del dímero de ácido láctico (L_2):

$$L_1 + L_1 \rightleftharpoons L_2 + H_2O \qquad (2)$$

Formación del trímero de ácido láctico (L_3):

$$L_1 + L_2 \rightleftharpoons L_3 + H_2O \qquad (3)$$

Formación del éster del dímero de ácido láctico (L_2E):

$$L_2 + EtOH \rightleftharpoons L_2E + H_2O \qquad (4)$$

Formación del trímero de éster de ácido láctico (L_3E):

$$L_3 + EtOH \rightleftharpoons L_3E + H_2O \qquad (5)$$

Las composiciones del ácido láctico se presentan en la Tabla 3. Respecto a las reacciones químicas, solo se consideran las Ecuaciones 1, 2 y 4, ya que se omitieron las Ecuaciones 3 y 5. Las expresiones cinéticas de cada componente se presentan en las Ecuaciones 6-8 [6].

$$-\frac{dx_{L_1E}}{dt} = w_{cat}[k_1^0 exp(-\frac{E_{A_1}}{RT})(x_{L_1}x_{EtOH} - \frac{x_{L_1E}x_w}{K_1})] \quad (6)$$

$$-\frac{dx_{L_2E}}{dt} = w_{cat}[k_2^0 exp(-\frac{E_{A_2}}{RT})(x_{L_1}x_{EtOH} - \frac{x_{L_2E}x_w}{K_2})] \quad (7)$$

$$-\frac{dx_{L_2}}{dt} = w_{cat}[k_3^0 exp(-\frac{E_{A_3}}{RT})(x_{L_2}x_w - \frac{x_{L_1}^2}{K_3})] \quad (8)$$

Los parámetros cinéticos, las constantes de equilibrio (Ki), los factores preexponenciales (ki^0) y las energías de activación (E_{Ai}), de la expresión cinética reversible simple de orden n se describen en la Tabla 9 [6].

Tabla 9 Parámetros del modelo cinético

Parámetro	Unidad	Valor
$k_1{}^0$	$kg_{sol}.K/kg_{cat}/s$	1.91 x 10^5
$k_2{}^0$	$kg_{sol}.K/kg_{cat}/s$	2.66 x 10^4
$k_3{}^0$	$kg_{sol}.K/kg_{cat}/s$	1.62 x 10^{57}
E_{A1}	kJ/kmol	4.80 x 10^4
E_{A2}	kJ/kmol	5.45 x 10^4
E_{A3}	kJ/kmol	5.20 x 10^4
K_1	-	2.40
K_2	-	0.600
K_3	-	5.00

Los parámetros cinéticos derivados de los resultados experimentales a una concentración de ácido láctico del 20 % en peso se utilizaron posteriormente para predecir la producción de LE a concentraciones del 50 % y el 85 % en peso.

Los errores porcentuales asociados, como se muestra en la tabla 10, se utilizaron para evaluar la precisión de las predicciones.

Tabla 10 Comparación de valores experimentales y predicción del modelo para la esterificación de ácido láctico al 20, 50 y 88 % en peso con etanol

Relación molar EtOH:LA	**Carga de catalizador (% en peso)**	**Temperatura de reacción (°C)**	**L_1**	**L_2**	**L_3**	**L_1E**	**L_2E**	**L_3E**	**EtOH**	**Agua**
Solución de ácido láctico al 88 % en peso										
1	3	80	8.7	19.9	24	20.5	37.1	25.1	10.9	5.2
2	3	80	8.9	17.2	15.5	10.1	15.9	25	4.4	2.3
3	3	80	13.9	15.8	11.2	7.7	12.2	20.5	2	2.1
4	3	80	22.2	21	12.8	2.7	16.9	25	1.1	0.9
3	1	80	11.3	9.8	9.3	11.2	16	31.2	1.6	2.1
3	2	80	7.4	10.1	7.6	7	9	29.8	1.4	1.6
3	4	80	15.7	7	4.8	3.6	5.7	29.1	1.4	1
3	5	80	11.5	33.4	27.9	2.6	6.6	16	1.2	0.6
3	3	62	8.3	1.2	1.8	2.5	9.6	31.5	0.8	0.8
3	3	72	5.5	3.5	3.2	0.6	3.6	13.1	0.6	0.2
3	3	90	9.5	41.8	25.9	6.6	14.5	29.6	3	4.2
Solución de ácido láctico al 50 % en peso										
1	3	80	2.6	6.9		20.2	49		6.2	0.4
2	3	80	2.2	5.1		11.2	29.2		2.9	0.04
3	3	80	5.1	10.3		4.8	37.1		1.1	0.4
4	3	80	8.4	20.4		5.0	25.9		0.5	0.6
3	1	80	4.2	1.8		13.0	14.7		2.0	0.2
3	2	80	5.6	6		4.0	24.4		1.0	0.4
3	4	80	6.3	14		3.5	24.7		1.4	0.4
3	3	62	6.6	3.2		14.2	39.1		0.4	0.8
3	3	72	7.1	8.4		5.2	14.8		1.2	0.6
3	3	90	1	20.8		4.1	34.8		1.2	0.5
Solución de ácido láctico al 20 % en peso										
1	3	80	1.5			9.2			0.8	0.06
2	3	80	1.4			3.5			0.3	0.05
3	3	80	1.8			4.2			0.2	0.07
4	3	80	4.4			17			0.1	0.2
3	1	80	5.8			9.7			1.3	0.4
3	2	80	1			5.8			0.2	0.03
3	4	80	2			14.1			0.7	0.2
3	3	60	1.2			2.8			0.2	0.08
3	3	70	2.5			5.6			0.5	0.2
3	3	90	1.2			4.6			0.2	0.05

Las predicciones generadas para los perfiles de componentes demostraron un alto grado de consistencia con los hallazgos experimentales obtenidos para la producción de LE utilizando ácido láctico al 20 % en peso.

En los experimentos con concentraciones de ácido láctico del 50 % y el 88 % en peso, los errores observados fueron mínimos. Cabe destacar que los errores se concentraron principalmente en la concentración de oligómeros y ésteres de oligómeros, que constituyen una proporción relativamente pequeña de los componentes totales.

Por lo tanto, su impacto en la concentración del componente primario fue insignificante. En este proyecto, los datos de simulación se obtendrán de trabajos publicados.

Las configuraciones del proceso de producción de LE mediante ácido láctico y etanol sobre el catalizador de resina de intercambio catiónico Amberlyst-15 y el proceso de recuperación de etanol se representan en las Tablas 5 y 6, respectivamente.

Este trabajo se centrará en comparar la rentabilidad del proceso y el consumo de energía.

3.3. Diseño conceptual

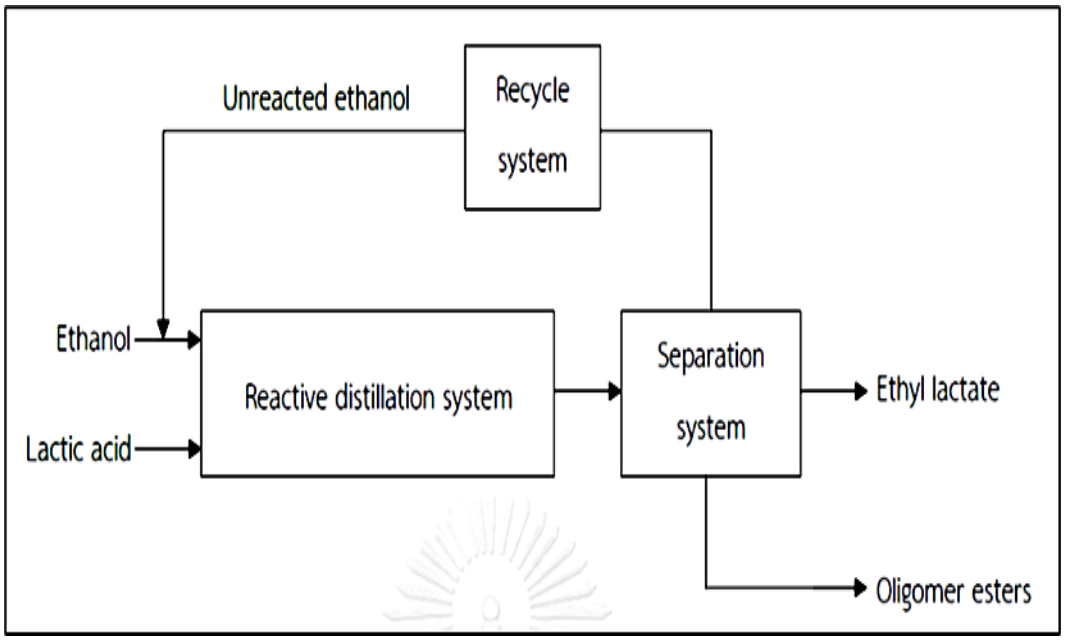

Fig. 7 Diagrama de flujo de bloques Producción de LE mediante esterificación.

El diseño conceptual representado en la Figura 7 se puede dividir en tres sistemas:

3.3.1. Sistema de destilación reactiva

Normalmente, la conversión de la materia prima en el proceso químico se produce en un reactor y el producto primario se clasifica mediante un separador. Si la reacción es líquido-líquido, el separador sería una torre destiladora.

Por lo tanto, el diseño general de la reacción líquido-líquido en el proceso químico requiere un reactor seguido de la torre destiladora. Sin embargo, la conversión de la materia prima en reacciones reversibles es limitada cuando se alcanza el equilibrio.

Como se mencionó anteriormente, la destilación reactiva es una nueva técnica que combina sistemas de reacción y separación en una sola operación.

La técnica de destilación reactiva no solo aumenta la pureza del producto, sino que también reduce los costos de capital, como el costo de la bomba, el costo del instrumental, etc.

La esterificación del etanol y el ácido láctico para producir LE se produce en la zona reactiva de la torre destiladora reactiva. Tras generar el LE, este se separa y se envía a través de una corriente de fondo. La presión de operación de la torre destiladora reactiva es constante de 1 atm.

3.3.2. Sistema de separación

La función principal de este sistema es purificar el LE y separar el etanol de las mezclas de etanol y agua para su recuperación en el sistema de reacción.

La principal unidad operativa del sistema de separación es la torre destiladora. En primer lugar, se utilizará el modelo de torre destiladora "DSTWU" de Aspen plus para calcular las estimaciones iniciales: ubicación de la alimentación, número de etapas, relación de reflujo y velocidad de destilado.

Se aplicarán cuatro variables de configuración de DSTWU al modelo de torre destiladora "RADFRAC" de Aspen plus. Posteriormente, se configurará la función DesignSpec de RADFRAC para variar la relación de reflujo y la velocidad de destilado y obtener la pureza deseada del producto al 99,5 % en peso.

3.3.3. Sistema de reciclaje

Para la esterificación de etanol y ácido láctico, se utiliza un catalizador de resina de intercambio catiónico Amberlyst-15, empacado en la zona reactiva de la torre destiladora reactiva.

El ácido láctico es el reactivo limitante. El etanol se utiliza en cantidad suficiente para reaccionar con el ácido láctico. El etanol no reaccionado del sistema de separación se recicla al sistema de reacción.

3.4. Descripción del proceso

El diagrama de flujo del proceso de producción de LE se ilustra en la Figura 8 utilizando el programa Aspen plus.

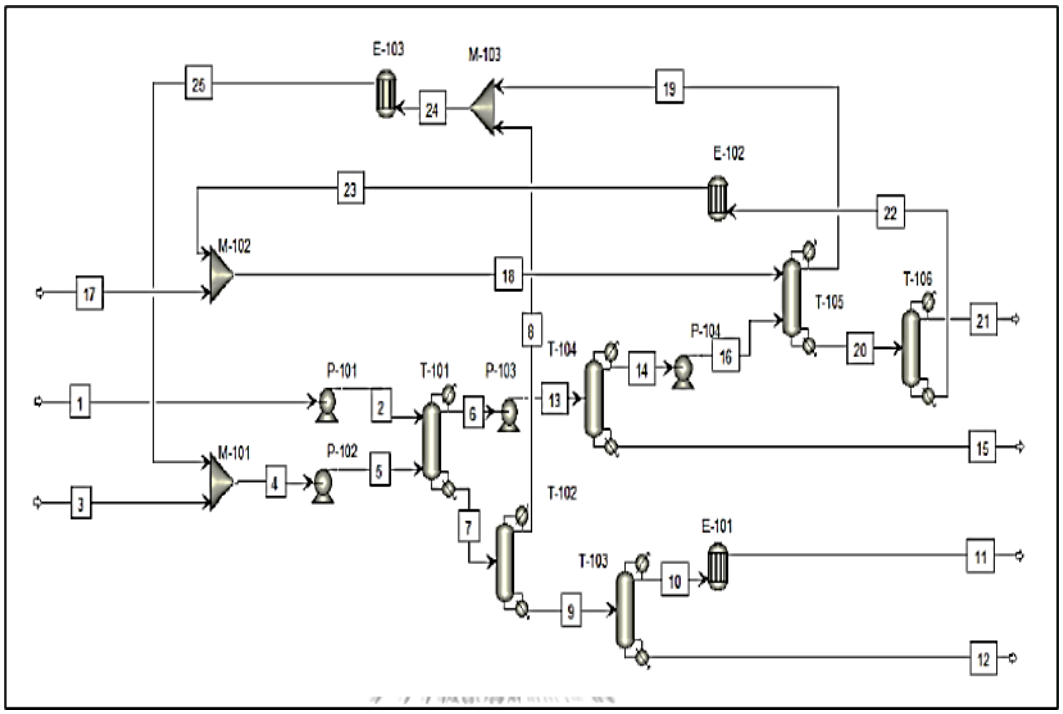

Fig. 8 PFD Producción de LE mediante esterificación para los escenarios 1 y 3.

Del diagrama de flujo del proceso en la Fig. 8, el 99,5 % en peso de etanol fresco (Corriente 3) se mezcla con el etanol sin reaccionar (Corriente 28) en el mezclador, M-101 y el ácido láctico sin reaccionar (Corriente 18), respectivamente.

El etanol mezclado (Corriente 4) y el ácido láctico fresco (Corriente 1) se alimentan a la torre destiladora reactiva, T-101. La reacción de esterificación de etanol y ácido láctico se produce sobre el catalizador de resina de intercambio catiónico Amberlyst-15 empaquetado en la sección reactiva de la torre destiladora reactiva para producir el producto primario, LE.

La corriente de salida de T-101 es la corriente 8, mezclas de LE, ésteres oligoméricos y etanol. El etanol en la corriente 7 se separa con una torre destiladora, T-102, como una corriente de destilado.

La corriente de fondo de T-102 (Corriente 9.ª) se envía a la torre destiladora T-103 para purificar el LE a una concentración del 99,9 % en peso (Corriente 10.ª) y ajustar la temperatura a 35 °C con los intercambiadores de calor E-101 para su almacenamiento (Corriente 11.ª).

Las mezclas de etanol y agua (Corriente 6) de T-101 se transfieren a la torre destiladora T-104 para recuperar el etanol. La mayor parte del etanol y el agua se separan en las corrientes 14 y 15, respectivamente.

El 90 % en peso de etanol de la corriente 14 se envía al sistema de purificación de etanol. T-105, una torre destiladora extractiva, se utiliza para purificar el etanol del 90 al 99,5 % en peso utilizando etilenglicol como disolvente (Corriente 17). El etilenglicol se recicla con una torre destiladora T-106.

El etanol sin reaccionar, al 99,5 % en peso, se ajusta a la temperatura de operación a 35 °C mediante intercambiadores de calor E-102 y se recicla de nuevo al proceso (Corriente 23). El diagrama de proceso de la Fig. 1 se aplica a los Escenarios 1 y 3. En el Escenario 2, el etanol de alimentación se encontraba en fase de vapor a 85 °C.

Por lo tanto, se requieren dos operaciones unitarias adicionales: un precalentador y un compresor antes de que reaccione con el ácido láctico en la destilación reactiva, T-101.

El diagrama de proceso de la Fig. 7 se aplica a los Escenarios 1 y 3. El diagrama de proceso del Escenario 2 se muestra en la Fig. 8. En el Escenario 2, el etanol de alimentación se encontraba en fase de vapor a 85 °C.

Por lo tanto, se requieren dos operaciones unitarias adicionales: un precalentador y un compresor antes de que reaccione con el ácido láctico en la destilación reactiva, T-101.

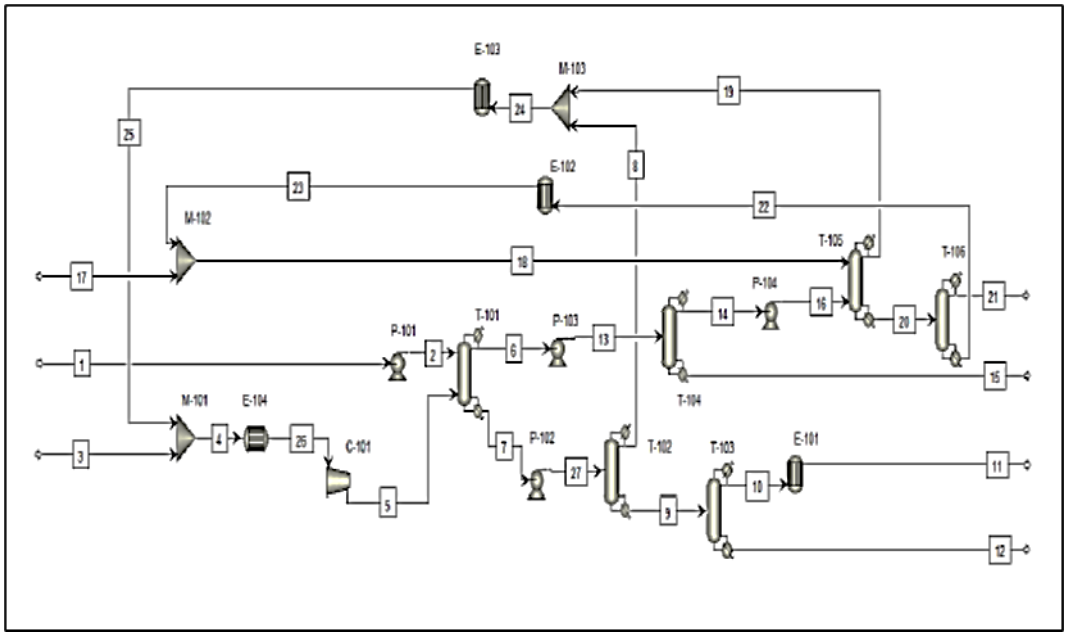

Fig. 9 Diagrama de flujo Producción de LE mediante esterificación para el escenario 2.

3.5. Modelo termodinámico utilizado

Las condiciones de operación del proceso de producción de LE son a baja presión; véase más detalle en la Tabla 6. De acuerdo con la directriz 16 de selección de modelos termodinámicos, existen componentes polares y un azeótropo binario entre el etanol y el agua.

Por lo tanto, el modelo termodinámico de coeficiente de actividad (NRTL) es adecuado para expresar el proceso de producción de LE.

3.6. Evaluación del proceso

3.6.1. Análisis económico

En la evaluación del proceso, la estimación inicial del costo se realizará utilizando el Analizador Económico Aspen Plus (APEA).

Los costos asociados con la producción de LE se presentan en la Tabla 11.

Tabla 11 Costos para la producción de LE

Componente	Unidad	Valor
Etanol	US$/L	0.58
Ácido láctico al 50% en peso	US$/kg	1.00
Ácido láctico al 85% en peso	US$/kg	1.90
LE	US$/kg	3.50
Etilenglicol	US$/kg	0.71

Las decisiones de inversión no deben basarse únicamente en el Valor Actual Neto (VAN), sino que también deben considerar otros factores como el Periodo de Recuperación (POP) y la Tasa Interna de Retorno (TIR).

El Periodo de Recuperación proporciona información sobre la duración de la inversión durante la cual las entradas netas de efectivo del proyecto son iguales a las salidas netas de efectivo.

La Tasa Interna de Retorno (TIR) sirve como indicador de la rentabilidad de un proyecto en relación con la rentabilidad mínima requerida o el valor de capital establecido.

3.6.2. Consumo energético

El consumo energético específico (CEE) es un factor importante para evaluar el rendimiento del proceso. El CEE se puede calcular mediante la siguiente ecuación.

$$\text{Consumo específico de energía (CEE)} = \frac{\text{Consumo de energía}}{\text{Cantidad de producto}}$$

La lista de precios de los servicios públicos utilizados para calcular el consumo de energía se muestra en la Tabla 12.

Tabla 12 Precio de los servicios

Utilidad	Unidad	Valor
Agua de refrigeración	US$/ton	0.015
Agua refrigerada	US$/ton	0.185
Electricidad	US$/kWh	0.06
Gas natural	US$/GJ	11.10
Vapor a baja presión	US$/ton	29.29
Vapor a media presión	US$/ton	29.59
Vapor a alta presión	US$/ton	29.97

3.6.3. Emisiones de dióxido de carbono

En términos de impacto ambiental, la implementación generalizada de proyectos destinados a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero se ha vuelto cada vez más necesaria debido al aumento de los niveles de dióxido de carbono en la atmósfera.

El consumo de energía desempeña un papel importante en las emisiones de dióxido de carbono. Las emisiones de dióxido de carbono pueden calcularse analizando la cantidad de energía consumida y el tratamiento de aguas residuales.

Los factores de emisión de dióxido de carbono equivalente se describen en la Tabla 13 [13].

Tabla 13 Factores de emisión de dióxido de carbono

Índice	Unidad	Valor
Electricidad	kg CO2-eq/kWhr	0.67
Aguas residuales	kg CO2-eq/kg COD removed	1

IV. DISCUSIÓN

4.1. Utilización de la materia prima

La Tabla 14 muestra la conversión y el rendimiento de la esterificación de etanol y ácido láctico entre una torre destiladora reactiva y un reactor de equilibrio.

Tabla 14 Comparación de la conversión y el rendimiento de una torre destiladora reactiva y un reactor de equilibrio.

Escenario	Retención de líquidos	Torre destiladora reactiva		Reactor de tanque agitado continuo	
		Conversión	Rendimiento*	Conversión	Rendimiento*
	m^3	%	%	%	%
1	38.5	74.3	90.6	1.44	114
2	42.8	81.5	80.2	1.60	114
3	26.7	87.9	128	1.56	294
4	20.4	81.3	119	1.14	309

*El rendimiento es la cantidad de un producto específico formado por cada mol de reactivo consumido.

El proceso de esterificación del ácido láctico con etanol se lleva a cabo en una torre destiladora reactiva, donde se utilizan dos corrientes de etanol distintas: la de alimentación fresca y la de recirculación.

Los resultados de la simulación indican una tasa de conversión del 74,3 %, 81,5 %, 87,9 % y 81,3 % para los escenarios 1, 2, 3 y 4, respectivamente. En los casos en que el proceso opera con una cantidad excesiva de etanol, se hace necesaria la recuperación de etanol. Por consiguiente, los rendimientos para los escenarios 1, 2, 3 y 4 son del 90,6 %, 80,2 %, 128 % y 119 %, respectivamente.

Al comparar la conversión y el rendimiento de la producción de LE entre una torre destiladora reactiva y un reactor de tanque agitado continuo, utilizando la misma retención de líquido y una capacidad de producción fija de 6200 kg/h, la torre destiladora reactiva presenta conversiones y rendimientos notablemente superiores en comparación con el reactor de tanque agitado continuo.

La torre destiladora reactiva, que integra las unidades de separación y reacción, separa consistentemente los reactivos, facilitando así un desplazamiento hacia adelante en el equilibrio de la reacción.

Para el rendimiento del método de reactor de tanque agitado continuo, una parte de los oligómeros de ácido láctico experimenta una reacción inversa, lo que conduce a la formación de monómeros de ácido láctico.

Este fenómeno da como resultado una relación molar del producto formado superior a 100 con respecto a la cantidad de monómero de ácido láctico utilizado.

4.2. Resultados simulados de la producción de LE

Como se detalló en el Capítulo anterior, los diagramas de flujo del proceso muestran los resultados de flujo obtenidos en la producción de LE bajo diferentes condiciones de operación.

En concreto, la Tabla 15 describe los resultados del Escenario 3, que presenta la mayor conversión y rendimiento.

Sin embargo, para capacidades alternativas, los resultados de flujo se pueden consultar en los Anexos.

Tabla 15 Resultados producción LE (LE) del Escenario 3.

Parameter	Units	Stream no.						
		1	2	3	4	5	6	7
Temperature	°C	35.0	35.0	35.0	35.0	35.0	79.5	166
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.00	1.34
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	122	122	60.1	171	171	231	61.6
Mass Flows	kg/hr	6.82×10^3	6.82×10^3	2.75×10^3	7.84×10^3	7.84×10^3	7.43×10^3	7.22×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	2.73×10^3	7.81×10^3	7.81×10^3	5.34×10^3	18.0
Water	kg/hr	1.19×10^3	1.19×10^3	13.7	22.2	22.2	2.07×10^3	0.170
L_1	kg/hr	4.24×10^3	4.24×10^3	0.00	0.00	0.00	17.2	496
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	6.25	6.25	0.0800	6.25×10^3
L_2	kg/hr	1.38×10^3	1.38×10^3	0.00	0.00	0.00	0.640	417
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	38.7
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.260	0.260	0.00	0.260

Tabla 16 Resultados producción LE del Escenario 3.
(Continuación)

Parameter	Units	Stream no.						
		8	9	10	11	12	13	14
Temperature	°C	80.8	169	154	35.0	234	79.5	78.0
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	0.450	61.2	52.8	52.8	8.34	231	139
Mass Flows	kg/hr	24.4	7.20×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	958	7.43×10^3	5.60×10^3
Ethanol	kg/hr	17.99	0.00	0.00	0.00	0.00	5.34×10^3	5.08×10^3
Water	kg/hr	0.170	0.00	0.00	0.00	0.00	2.07×10^3	517
L_1	kg/hr	0.00	496	0.500	0.500	496	17.2	0.00
L_1E	kg/hr	6.25	6.24×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	6.25	0.0800	0.00
L_2	kg/hr	0.00	417	0.00	0.00	417	0.64	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	38.7	0.00	0.00	38.7	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.26	0.01	0.01	0.24	0.00	0.00

Tabla 17 Resultados producción LE del Escenario 3.
(Continuación)

Parameter	Units	Stream no.						
		15	16	17	18	19	20	21
Temperature	°C	96.5	78.0	35.0	35.0	78.0	158	96.8
Pressure	bar	1.34	1.34	1.34	1.34	1.00	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	92.1	139	1.38	137	110	166	30.0
Mass Flows	kg/hr	1.84×10^3	5.60×10^3	85.3	8.50×10^3	5.07×10^3	9.03×10^3	614
Ethanol	kg/hr	267	5.08×10^3	0.00	0.00	5.06×10^3	20.3	20.3
Water	kg/hr	1.55×10^3	517	0.09	5.22	8.27	514	509
L_1	kg/hr	17.2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.0800	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2	kg/hr	0.640	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	85.2	8.49×10^3	0.260	8.49×10^3	84.9

Tabla 18 Resultados producción LE del Escenario 3.
(Continuación)

Parameter	Units	Stream no.			
		22	23	24	25
Temperature	°C	206	35.0	78.0	35.0
Pressure	bar	1.34	1.34	1.00	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	136	136	111	111
Mass Flows	kg/hr	8.41×10^3	8.41×10^3	5.09×10^3	5.09×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	5.08×10^3	5.08×10^3
Water	kg/hr	5.14	5.14	8.44	8.44
L_1	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	6.25	6.25
L_2	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	8.41×10^3	8.41×10^3	0.260	0.260

4.3. Análisis económico

Este estudio presenta un análisis técnico-económico exhaustivo de los procesos de producción de LE, utilizando el software Aspen Economic Analyzer y adoptando un cronograma de proyecto fijo de 10 años.

Para realizar la evaluación económica, establecimos cuatro escenarios de producción, considerando los precios de referencia tanto para productos químicos

como para servicios públicos, como se describe en las Tablas 5 y 10, respectivamente.

Estos hallazgos demuestran que, con base en estos precios de referencia, todos los escenarios de producción de LE son económicamente viables y rentables a lo largo del cronograma de 10 años del proyecto.

Utilizando el avanzado software Aspen Economic Analyzer, realizamos un análisis del proceso de esterificación de ácido láctico y etanol a diferentes concentraciones de ácido láctico.

Específicamente, los Escenarios 1 y 2 implicaron la alimentación de ácido láctico al 50 % en peso, mientras que los Escenarios 3 y 4 utilizaron una alimentación de ácido láctico al 85 % en peso.

Nuestra evaluación económica integral de este proceso se presenta en la Tabla 19.

Tabla 16. Valor actual neto (VAN), tasa interna de retorno (TIR) y período de recuperación (POP) en diferentes escenarios de producción de LE.

Tabla 19 Resultados del flujo de producción de LE del Escenario 3.

Ítem	Unidades	Escenarios			
		1	2	3	4
Valor actual neto	USD	7.82×10^6	2.48×10^7	1.76×10^8	7.72×10^7
Tasa interna de retorno	%	21.3	24.1	74.6	37.9
Período de pago	y	17.2	13.2	3.41	6.79

Como se muestra en la tabla, si bien los Escenarios 1 y 2 presentan menos impurezas en la materia prima que los Escenarios 3 y 4, no son económicamente ventajosos.

Debido a que el alto consumo de etanol en exceso generó altos costos operativos para los Escenarios 1 y 2.

El resultado económico del proceso de producción de LE del Escenario 3, con una composición de ácido láctico del 85 % en peso y una temperatura de alimentación de etanol de 25 °C, arroja un buen valor económico con un VPN de $1,76 \times 10^{-1}$ USD, una TIR del 74,6 % y una vida útil de 3,41 años.

4.4. Consumo de energía

La operación de la unidad primaria que consume mucha energía en este proceso de producción consta de dos partes: el intercambiador de calor y la columna de destilación.

El consumo de energía de cada equipo se presenta y compara en la Figura 10.

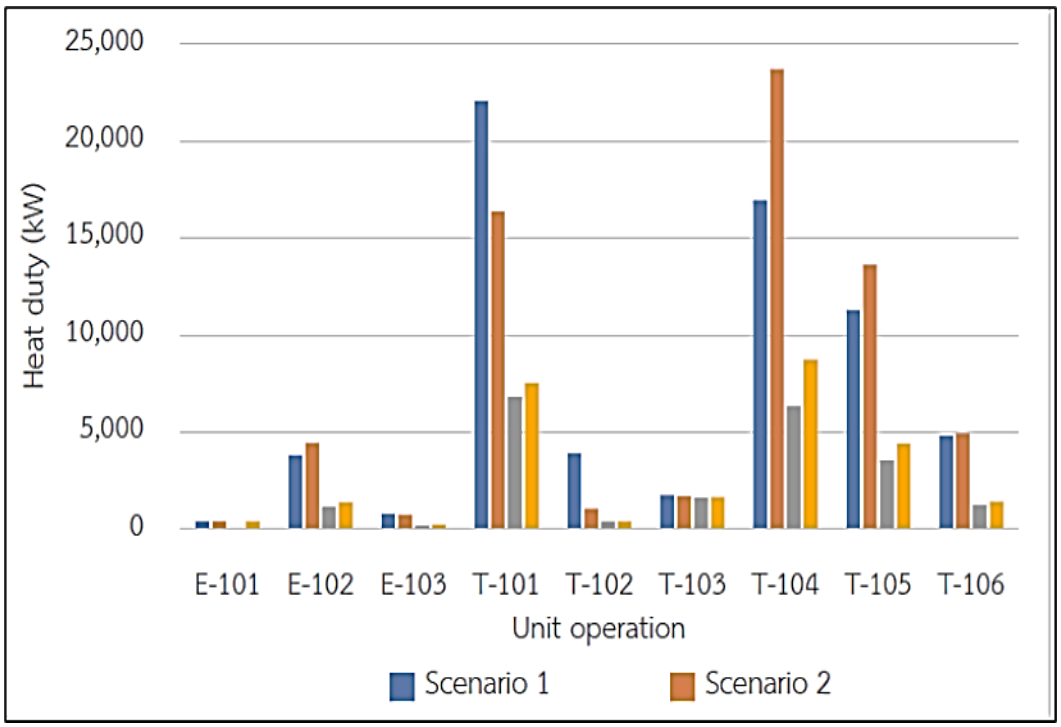

Fig. 10 Rutas de metodología de la investigación

Según la Figura 10, las columnas de destilación T-101 y T-104 son los dispositivos que consumen más energía, con un promedio del 60% del consumo total de energía en el proceso de producción.

La torre destiladora T-101 es un dispositivo de destilación reactiva y es la unidad de operación principal en la producción de LE. Tiene un alto contenido inicial de sustancia, lo que conduce a un alto consumo de energía.

La torre destiladora T-104, por otro lado, separa el etanol del agua. Las sustancias alimentadas a esta operación unitaria incluyen etanol residual de la reacción, agua de la sustancia inicial y agua generada a partir de la reacción.

Debido al uso excesivo de etanol en la reacción, la cantidad de etanol y agua que ingresa a la torre destiladora T-104 es grande, lo que resulta en un consumo de energía significativo para la separación.

El consumo de energía dentro del proceso estudiado se puede clasificar ampliamente en dos categorías: servicios eléctricos y térmicos. Hemos tabulado las cantidades respectivas de estos servicios públicos para cada escenario en la Tabla 20.

Tabla 20 Resumen del consumo energético

Ítem	Unidades	Escenarios			
		1	2	3	4
Servicio de calentamiento Total	kW	1.94×10^4	3.19×10^4	8.49×10^3	1.20×10^4
Servicio de enfriamiento Total	kW	2.70×10^4	2.92×10^4	7.70×10^3	9.34×10^3
Producción de L1E	kg L_1E/h	6.24×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	6.20×10^3
CEE	kWh/kg L_1E	7.43	9.82	2.60	3.45

Además, la evaluación de la eficiencia energética se ha llevado a cabo calculando el Consumo de Energía Específico (CEE), que es la relación entre la electricidad total consumida y la cantidad total de LE generado.

Con base en los valores SEC obtenidos para los Escenarios 1, 2, 3 y 4, que son 7,43, 9,82, 2,60 y 3,45 kWh/kg de producto, respectivamente, se puede inferir que el Escenario 3 demuestra la mayor eficiencia energética ya que utiliza la menor cantidad de energía.

4.5. Evaluación de emisiones de dióxido de carbono

Las cantidades totales de CO2 equivalente liberadas en el proceso se obtienen principalmente de la electricidad, los servicios públicos del proceso y el tratamiento de residuos.

En la Tabla 18 se muestra la cantidad de CO2 generada en cada capacidad de producción de LE.

Tabla 21 Emisiones equivalentes de dióxido de carbono

Ítem	Unidades	Escenarios			
		1	2	3	4
Electricidad	kg CO_2/year	$2.31x10^8$	$3.06x10^8$	$8.08x10^7$	$1.07x10^8$
Tratamiento de residuos	kg CO_2/year	$4.28x10^7$	$4.25x10^7$	$1.46x10^7$	$2.40x10^7$
Producción de productos	kg L_1E/h	6,240.39	6,239.09	6,239.08	6,203.56
Emisiones totales de CO2	kg CO_2/kg L_1E	5.49	6.97	1.91	2.63

La baja concentración de ácido láctico en los Escenario 1 y 2 que contribuye al aumento de la cantidad de exceso de etanol y desechos.

El exceso de etanol requiere mucha energía para separar el etanol del producto en cualquier torre destiladora y recuperar el etanol que no ha reaccionado.

Para los Escenarios 3 y 4, el Escenario 4 tiene un aumento en el consumo de energía de operaciones unitarias adicionales que ingresan al proceso de producción para el cambio de fase del etanol de líquido a vapor, lo que resulta en mayores emisiones de dióxido de carbono que el Escenario 3.

V. CONCLUSIONES

- ✓ Los biosolventes están ganando cada vez más importancia en la industria química, ya que proporcionan una alternativa más sostenible y respetuosa con el medio ambiente a los disolventes tradicionales. El LE, uno de los biodisolventes, es un disolvente versátil y sostenible que ofrece varios beneficios a la industria química, como baja toxicidad, biodegradabilidad, alto poder de solvencia, recurso renovable, etc. Por lo tanto, en este trabajo, se procesa la utilización de ácido láctico y etanol para producir LE mediante esterificación de ácido láctico y etanol debido a los muchos beneficios de acetaldehído y su mayor precio.

- ✓ En este trabajo, la simulación del proceso y el análisis económico de la producción de LE se llevan a cabo mediante Aspen Plus y Aspen Economic Analyzer, respectivamente. Los resultados del experimento se obtuvieron de la literatura publicada sobre la esterificación del ácido láctico con etanol utilizando Amberlyst-15 como catalizador a diferentes concentraciones de ácido láctico y temperatura de alimentación de etanol. La simulación se divide en cuatro escenarios según las condiciones.

- ✓ Con base en el análisis realizado con la misma capacidad de producción de LE, se puede inferir que el Escenario 3, operando a una concentración de ácido láctico del 85% en peso y una temperatura de 25 °C, representa la condición óptima. Esta conclusión se extrae de la observación de que el Escenario 3 ofrece la tasa interna de rendimiento (%TIR) más alta, al mismo tiempo que exhibe el consumo de energía y las emisiones de dióxido de carbono más bajos, destacando así su desempeño económico y ambiental superior.

- ✓ En cuanto a los requerimientos energéticos (termodinámica), se observó que los procesos realizados en los Escenarios 2 y 4 implican la utilización de cantidades importantes de servicios eléctricos, debido a la incorporación al proceso de un intercambiador de calor y un compresor de gas.

- ✓ Por otro lado, los procesos implementados en los Escenarios 1 y 2 implican el consumo de cantidades sustanciales de servicios térmicos, principalmente debido a la entrada de una gran cantidad de etanol al proceso, lo que requiere el reciclaje de la mayor cantidad de etanol sin reaccionar. En consecuencia, se impone al proceso una carga de utilidad térmica significativa.

- ✓ Al determinar el escenario más adecuado para sintetizar LE a partir de ácido láctico y etanol, se encontró que las condiciones óptimas (fenomenología) implican producir acetaldehído a una concentración de ácido láctico del 85% en peso y una temperatura de alimentación de 25 °C para etanol.

- ✓ Esta conclusión se basa en la observación de que este escenario ofrece la tasa interna de rendimiento (%TIR) más alta y el período de recuperación más corto (POP) en comparación con los otros escenarios. Estos resultados económicos favorables pueden atribuirse a varios factores, incluido un menor exceso de necesidad de etanol, una menor demanda de servicios públicos y menores costos de equipo para el proceso. Como tal, se puede concluir que el Escenario 3 representa la opción económicamente más viable para la producción de LE.

VI. RECOMENDACIONES

- El tema de este trabajo es el desarrollo y la optimización de un proceso para la producción de LE mediante destilación reactiva. Se deben determinar las condiciones óptimas de operación utilizando una planta piloto existente y se debe proponer una configuración adecuada para el proceso global (incluyendo la recuperación de sustancias químicas y el procesamiento posterior del producto).

- Para implementar con éxito una operación de destilación reactiva, se deben cumplir dos requisitos: En primer lugar, la operación de separación debe funcionar correctamente para garantizar el efecto de la intensificación del proceso. En la producción de LE, esto significa que el agua, como subproducto de la reacción de esterificación, debe eliminarse de la zona reactiva al producto de cabeza en una cantidad suficiente.

- En segundo lugar, la reacción de esterificación debe ser lo suficientemente rápida en las condiciones de operación para alcanzar una conversión satisfactoria de ácido láctico dentro del tiempo medio de residencia de la columna.

VII. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

[1] M. Doble y A. K. Kruthiventi, Alternate Solvents, Academic Press, 2007, pp. 97-98.

[2] P. T. Anastas y H. David G., Case Studies - Green Chemistry in Practice, Elsevier, 2016.

[3] MarketWatch, «Product Dynamics and Consum er Dem ographics Trends with Top Key Player,» 20 01 2025. [En línea]. Available: https://www.marketgrowthreports.com.

[4] C. S. M. Pereira y et al., «Ethyl Lactate as a Solvent: Properties, Applications and Production Processes,» *Green Chemistry,* nº 13, pp. 2658-71, 2011.

[5] A. Corma y et al., «Chemical Routes for the Transformation of Biomass into Chemicals,» *Chemical Reviews,* nº 107, pp. 2411-502, 2007.

[6] N. Asthana y et al., «A Continuous Reactive Separation Process for Ethyl Lactate Formation,» *Organic Process Research & Development,* nº 9, pp. 599-607, 2005.

[7] P. Hidalgo y et al., «Advances in Direct Transesterification Microalgal Biomass for Biodiesel Production,» *Springer Science+Business Media Dordrecht,* p. 186, 2013.

[8] D. J. Miller y et al., Process for Production of Organic Acd Esters, United States, 2010.

[9] V. Sakhre, «Reactive Distillation: Modeling, Sim ulation, and Optimization,» de *Distillation - Modelling, Simulation and Optimization*, 2019.

[10] H. Zentou y et al., «Overview of Alternative Ethanol Removal Techniques for Enhancing Bioethanol Recovery from Fermentation Broth,» *Processes,* nº 7, p. 458, 2019.

[11] L. Guangzhong y B. Peng, «New Operation Strategy for Separation of Ethanol−Water by Extractive Distillation,» *Industrial and Engineering Chemistry Research,* nº 51, pp. 2723-29, 2012.

[12] D. T. Vu y et al., «Oligomer Distribution in Concentrated Lactic Acid Solutions,» *Fluid Phase Equilibria,* nº 125, pp. 125-35, 2005.

[13] M. Hafiz y et al., «Cleaner Production Implementation at Chicken Slaughtering Plant,» *International Journal of Applied Environmental Sciences,* nº 11, pp. 515-23, 2016.

ANEXOS

ESTIMACIÓN DE LA MATERIA PRIMA

Este trabajo consiste en simular el proceso de producción de LE mediante la esterificación de ácido láctico con etanol sobre el catalizador Amberlyst-15, utilizando concentraciones variables de ácido láctico. Los datos resultantes de esta reacción experimental se presentan en la Tabla A1, de acuerdo con las convenciones establecidas.

Tabla 22 Conversión y rendimiento en la esterificación de ácido láctico con etanol mediante una torre destiladora reactiva

Scenario	LA feed comp.	EtOH feed Temp.	LA feed rate	EtOH feed rate	EtOH feed recycle	LA Conv.	Yield
	wt.%.	°C	kg/h	kg/h	kg/h	%	%
1	50	25	15,293.41	3,370.13	22,572.62	74.34	67.34
2	50	85	14,324.15	3,568.64	20,715.59	81.46	71.88
3	85	25	6816.04	2,746.26	5,090.85	87.88	112.44
4	85	85	7,893.92	2,804.68	6,318.07	81.28	96.54

Table C1. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 1.

Parameters	Units	Stream no.						
		1	2	3	4	5	6	7
Temperature	℃	35.0	35.0	35.0	35.0	35.0	80.0	96.4
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.00	1.34
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	510	510	73.7	566	566	854	221
Mass Flows	kg/hr	1.53×10^4	1.53×10^4	3.37×10^3	2.59×10^4	2.59×10^4	2.57×10^4	1.55×10^4
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	3.35×10^3	2.59×10^4	2.59×10^4	1.69×10^4	6.48×10^3
Water	kg/hr	7.71×10^3	7.71×10^3	16.8	77.1	77.1	8.76×10^3	25.2
L_1	kg/hr	7.08×10^3	7.08×10^3	0.00	0.00	0.00	23.0	1.79×10^3
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	6.25	6.25	0.0500	6.25×10^3
L_2	kg/hr	505	505	0.00	0.00	0.00	0.220	939
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	18.6
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.770	0.770	0.00	0.770

Table C1. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 1 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		8	9	10	11	12	13	14
Temperature	℃	78	177	154	35.0	232	80.0	78.2
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	142	78.7	52.9	52.9	25.8	854	471
Mass Flows	kg/hr	6.51×10^3	9.00×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	2.76×10^3	2.57×10^4	1.83×10^4
Ethanol	kg/hr	6.48×10^3	1.38	1.38	1.38	0.00	1.69×10^4	1.61×10^4
Water	kg/hr	25.15	0.03	0.03	0.03	0.00	$8{,}76 \times 10^3$	2.19×10^3
L_1	kg/hr	0.00	1.79×10^3	1.79	1.79	1.79×10^3	23.0	0.00
L_1E	kg/hr	6.25	6.25×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	6.25	0.0500	0.00
L_2	kg/hr	0.00	939	0.00	0.00	939	0.220	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	18.6	0.00	0.00	18.6	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.770	0.0100	0.0100	0.760	0.00	0.00

Table C1. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 1 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		15	16	17	18	19	20	21
Temperature	℃	98.1	78.2	35.0	35.0	78	153	97.4
Pressure	bar	1.34	1.34	1.34	1.34	1.00	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	384	471	4.61	460	350	581	126
Mass Flows	kg/hr	7.44×10^3	1.83×10^4	286	2.85×10^4	1.61×10^4	3.07×10^4	2.50×10^3
Ethanol	kg/hr	847	1.61×10^4	0.00	0.00	1.60×10^4	64.4	64.4
Water	kg/hr	6.57×10^3	2.19×10^3	0.290	22.1	35.1	2.18×10^3	2.16×10^3
L_1	kg/hr	23.0	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.0500	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2	kg/hr	0.220	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	285	2.85×10^4	0.770	2.85×10^4	285

Table C1. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 1 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.			
		22	23	24	25
Temperature	℃	206	35.0	78.0	35.0
Pressure	bar	1.34	1.34	1.00	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	455	455	492	492
Mass Flows	kg/hr	2.82×10^4	2.82×10^4	2.26×10^4	2.26×10^4
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	2.25×10^4	2.25×10^4
Water	kg/hr	21.8	21.8	60.2	60.2
L_1	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	6.25	6.25
L_2	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	2.82×10^4	2.82×10^4	0.770	0.770

Table C2. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 2

Parameters	Units	Stream no.						
		1	2	3	4	5	6	7
Temperature	℃	35.0	35.0	35.0	35.0	85.0	79.5	114
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.14	1.00	1.14
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	477	477	78.1	529	529	907	98.9
Mass Flows	kg/hr	1.43×10^4	1.43×10^4	3.57×10^3	2.43×10^4	2.43×10^4	2.89×10^4	9.71×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	3.55×10^3	2.42×10^4	2.42×10^4	2.06×10^4	1.18×10^3
Water	kg/hr	7.22×10^3	7.22×10^3	17.8	57.0	57.0	8.29×10^3	6.04
L_1	kg/hr	6.63×10^3	6.63×10^3	0.00	0.00	0.00	19.1	1.21×10^3
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	6.25	6.25	0.01	6.25×10^3
L_2	kg/hr	473	473	0.00	0.00	0.00	0.170	1.02×10^3
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	29.8
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	0.00	1.16	1.16	0.00	1.16

Table C2. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 2 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		8	9	10	11	12	13	14
Temperature	℃	78.0	174	154	35.0	235	80	78.0
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	26.1	72.8	52.8	52.8	20	907	540
Mass Flows	kg/hr	1.20×10^3	8.51×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	2.27×10^3	2.89×10^4	2.16×10^4
Ethanol	kg/hr	1.18×10^3	0.13	0.13	0.13	0.00	2.06×10^4	1.96×10^4
Water	kg/hr	6.03	0.01	0.01	0.01	0.00	8.29×10^3	2.07×10^3
L_1	kg/hr	0.00	1.21×10^3	1.21	1.21	1.21×10^3	19.10	0.00
L_1E	kg/hr	6.25	6.24×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	6.25	0.01	0.00
L_2	kg/hr	0.00	1.02×10^3	0.00	0.00	1.02×10^3	0.17	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	29.8	0.00	0.00	29.8	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	1.16	0.03	0.03	1.13	0.00	0.00

Table C2. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 2 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		15	16	17	18	19	20	21
Temperature	℃	96.6	78.0	35.0	35.0	78.0	157	97.0
Pressure	bar	1.34	1.34	1.34	1.34	1.00	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	368	540	5.39	536	425	651	120
Mass Flows	kg/hr	7.27×10^3	2.16×10^4	334	3.32×10^4	1.95×10^4	3.54×10^4	2.45×10^3
Ethanol	kg/hr	1.02×10^3	1.96×10^4	0.00	0.00	1.95×10^4	78.3	78.3
Water	kg/hr	6.22×10^3	2.07×10^3	0.330	20.9	33.2	2.06×10^3	2.04×10^3
L_1	kg/hr	19.1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.0100	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2	kg/hr	0.170	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	333	3.32×10^4	1.16	3.32×10^4	332

Table C2. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 2 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.					
		22	23	24	25	26	27
Temperature	℃	206	35.0	78.0	35.0	78.0	114
Pressure	bar	1.34	1.34	1.00	1.00	1.00	1.34
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	531	531	451	451	529	99.0
Mass Flows	kg/hr	3.29×10^4	3.29×10^4	2.07×10^4	2.07×10^4	2.43×10^4	9.71×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	2.07×10^4	2.07×10^4	2.42×10^4	1.18×10^3
Water	kg/hr	20.6	20.6	39.2	39.2	57.0	6.04
L_1	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.21×10^3
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	6.25	6.25	6.25	6.25×10^3
L_2	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.02×10^3
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	29.8
Ethylene glycol	kg/hr	3.29×10^4	3.29×10^4	1.16	1.16	1.16	1.16

Table C3. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 3

Parameter	Units	Stream no.						
		1	2	3	4	5	6	7
Temperature	℃	35.0	35.0	35.0	35.0	35.0	79.5	166
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.00	1.34
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	122	122	60.1	171	171	231	61.6
Mass Flows	kg/hr	6.82×10^3	6.82×10^3	2.75×10^3	7.84×10^3	7.84×10^3	7.43×10^3	7.22×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	2.73×10^3	7.81×10^3	7.81×10^3	5.34×10^3	18.0
Water	kg/hr	1.19×10^3	1.19×10^3	13.7	22.2	22.2	2.07×10^3	0.170
L_1	kg/hr	4.24×10^3	4.24×10^3	0.00	0.00	0.00	17.2	496
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	6.25	6.25	0.0800	6.25×10^3
L_2	kg/hr	1.38×10^3	1.38×10^3	0.00	0.00	0.00	0.640	417
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	38.7
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.260	0.260	0.00	0.260

Table C3. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 3 (Cont'd)

Parameter	Units	Stream no.						
		8	9	10	11	12	13	14
Temperature	℃	80.8	169	154	35.0	234	79.5	78.0
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	0.450	61.2	52.8	52.8	8.34	231	139
Mass Flows	kg/hr	24.4	7.20×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	958	7.43×10^3	5.60×10^3
Ethanol	kg/hr	17.99	0.00	0.00	0.00	0.00	5.34×10^3	5.08×10^3
Water	kg/hr	0.170	0.00	0.00	0.00	0.00	2.07×10^3	517
L_1	kg/hr	0.00	496	0.500	0.500	496	17.2	0.00
L_1E	kg/hr	6.25	6.24×10^3	6.24×10^3	6.24×10^3	6.25	0.0800	0.00
L_2	kg/hr	0.00	417	0.00	0.00	417	0.64	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	38.7	0.00	0.00	38.7	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.26	0.01	0.01	0.24	0.00	0.00

Table C3. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 3 (Cont'd)

Parameter	Units	Stream no.						
		15	16	17	18	19	20	21
Temperature	℃	96.5	78.0	35.0	35.0	78.0	158	96.8
Pressure	bar	1.34	1.34	1.34	1.34	1.00	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	92.1	139	1.38	137	110	166	30.0
Mass Flows	kg/hr	1.84×10^3	5.60×10^3	85.3	8.50×10^3	5.07×10^3	9.03×10^3	614
Ethanol	kg/hr	267	5.08×10^3	0.00	0.00	5.06×10^3	20.3	20.3
Water	kg/hr	1.55×10^3	517	0.09	5.22	8.27	514	509
L_1	kg/hr	17.2	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.0800	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2	kg/hr	0.640	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	85.2	8.49×10^3	0.260	8.49×10^3	84.9

Table C3. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 3 (Cont'd)

Parameter	Units	Stream no.			
		22	23	24	25
Temperature	°C	206	35.0	78.0	35.0
Pressure	bar	1.34	1.34	1.00	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	136	136	111	111
Mass Flows	kg/hr	8.41×10^3	8.41×10^3	5.09×10^3	5.09×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	5.08×10^3	5.08×10^3
Water	kg/hr	5.14	5.14	8.44	8.44
L_1	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	6.25	6.25
L_2	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	8.41×10^3	8.41×10^3	0.260	0.260

Table C4. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 4

Parameters	Units	Stream no.						
		1	2	3	4	5	6	7
Temperature	℃	35.0	35.0	35.0	35.0	85.0	79.3	172
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.14	1.00	1.14
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	141	141	61.4	199	199	271	68.4
Mass Flows	kg/hr	7.89×10^3	7.89×10^3	2.80×10^3	9.12×10^3	9.12×10^3	8.96×10^3	8.06×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	2.79×10^3	9.09×10^3	9.09×10^3	6.66×10^3	3.74
Water	kg/hr	1.38×10^3	1.38×10^3	14.0	23.2	23.2	2.28×10^3	0.0500
L_1	kg/hr	4.91 v	4.91×10^3	0.00	0.00	0.00	19.1	900
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	6.22	6.22	0.0500	6.22×10^3
L_2	kg/hr	1.60×10^3	1.60×10^3	0.00	0.00	0.00	0.70	894
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	44.7
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.270	0.270	0.00	0.270

Table C4. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 4 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		8	9	10	11	12	13	14
Temperature	℃	89.0	173	154	35.0	236	79.3	78.0
Pressure	bar	1.00	1.34	1.00	1.00	1.34	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	0.140	68.3	52.	52.52	15.8	271	169
Mass Flows	kg/hr	10.00	8.05×10^3	6.20×10^3	6.20×10^3	1.84×10^3	8.96×10^3	6.89×10^3
Ethanol	kg/hr	3.74	0.00	0.00	0.00	0.00	6.66×10^3	6.32×10^3
Water	kg/hr	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	2.28×10^3	570
L_1	kg/hr	0.00	900	0.90	0.90	899	19.1	0.00
L_1E	kg/hr	6.22	6.21×10^3	6.20×10^3	6.20×10^3	6.21	0.0500	0.00
L_2	kg/hr	0.00	894	0.00	0.00	894	0.700	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	44.7	0.00	0.00	44.7	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.270	0.0100	0.0100	0.260	0.00	0.00

Table C4. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 4 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.						
		15	16	17	18	19	20	21
Temperature	°C	95.8	78.0	35.0	35.0	78.0	160	96.5
Pressure	bar	1.34	1.34	1.34	1.34	1.00	1.34	1.00
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	102	169	1.67	166	137	198	33.4
Mass Flows	kg/hr	2.06×10^3	6.89×10^3	103	1.03×10^4	6.31×10^3	1.09×10^4	689
Ethanol	kg/hr	333	6.32×10^3	0.00	0.00	6.30×10^3	25.3	25.3
Water	kg/hr	1.71×10^3	570	0.10	5.77	9.13	567	561
L_1	kg/hr	19.1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_1E	kg/hr	0.05	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2	kg/hr	0.70	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
Ethylene glycol	kg/hr	0.00	0.00	103	1.03×10^4	0.270	1.03×10^4	103

Table C4. Stream results of ethyl lactate production of Scenario 4 (Cont'd)

Parameters	Units	Stream no.					
		22	23	24	25	26	27
Temperature	℃	206	35.0	78.0	35.0	78.1	172
Pressure	bar	1.34	1.34	1.00	1.00	1.00	1.34
Molar Vapor Fraction		0.00	0.00	0.00	0.00	1.00	0.00
Mole Flows	kmol/hr	164	164	137	137	199	68.4
Mass Flows	kg/hr	1.02×10^4	1.02×10^4	6.32×10^3	6.32×10^3	9.12×10^3	8.06×10^3
Ethanol	kg/hr	0.00	0.00	6.30×10^3	6.30×10^3	9.09×10^3	3.74
Water	kg/hr	5.67	5.67	9.17	9.17	23.2	0.0500
L_1	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	900
L_1E	kg/hr	0.00	0.00	6.22	6.22	6.22	6.22×10^3
L_2	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	894
L_2E	kg/hr	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	44.7
Ethylene glycol	kg/hr	1.02×10^4	1.02×10^4	0.270	0.270	0.270	0.270

APPENDIX C UTILITIES SPECIFICATIONS

Table D1. Utilities specifications of ethyl lactate production of Scenario 1, 2, and 3

Utility	Code	Type	Temperature (°C)	
			Inlet	Outlet
Cooling water	CW	Water	20	25
Chilled water	CHILLED	Water	5	10
Low pressure steam	LPS	Steam	125	124
Medium pressure steam	MPS	Steam	175	174
High pressure steam	HPS	Steam	250	249

APPENDIX D EQUIPMENT SPECIFICATIONS

D.1 Heat exchanger specifications

Table D1. Heat exchanger specifications

Scenario	Unit code	Utility type	Utility usage	Heat duty	Area
			(kg/hr)	(kW)	(m^2)
1	E-101	CW	7.14×10^4	414	27.6
	E-102	CW	6.55×10^5	3.80×10^3	201
	E-103	CW	1.36×10^5	791	92.6
2	E-101	CW	7.15×10^4	415	27.6
	E-102	CW	7.66×10^5	4.44×10^3	235
	E-103	CW	1.25×10^5	726	85.0
	E-104	LPS	1.09×10^4	6.61×10^3	70.8
3	E-101	CW	7.15×10^4	4.5	27.6
	E-102	CW	1.96E+05	1.14×10^3	60.0
	E-103	CW	3.08×10^4	178	20.9
4	E-101	CW	7.11×10^4	412	27.4
	E-102	CW	2.37×10^5	1.37×10^3	72.6
	E-103	CW	3.82×10^4	221	29.6
	E-104	LPS	4.08×10^3	2.49×10^3	26.6

D.2 Distillation column specifications

Table D2. Heat exchanger of distillation column specifications

Scenario	Unit code	Unit name	Utility type	Utility usage (kg/hr)	Heat duty (kW)
1	T-101	Condenser	CW	1.70×10^{6}	-9.86×10^{3}
		Reboiler	LPS	2.00×10^{4}	1.22×10^{4}
	T-102	Condenser	CW	3.07×10^{5}	-1.78×10^{3}
		Reboiler	HPS	4.49×10^{3}	2.14×10^{3}
	T-103	Condenser	CW	1.48×10^{5}	-859
		Reboiler	HPS	1.85×10^{3}	884
	T-104	Condenser	CW	1.45×10^{6}	-8.39×10^{3}
		Reboiler	LPS	1.40×10^{4}	8.54×10^{3}
	T-105	Condenser	CW	7.42×10^{5}	-4.30×10^{3}
		Reboiler	MPS	1.24×10^{4}	7.00×10^{3}
	T-106	Condenser	CW	3.16×10^{5}	-1.83×10^{3}
		Reboiler	HPS	6.23×10^{3}	2.98×10^{3}
2	T-101	Condenser	CW	1.79×10^{6}	-1.04×10^{4}
		Reboiler	LPS	9.79×10^{3}	5.96×10^{3}
	T-102	Condenser	CW	6.50×10^{4}	-377
		Reboiler	HPS	1.41×10^{3}	673
	T-103	Condenser	CW	1.44×10^{5}	-835
		Reboiler	HPS	1.79×10^{3}	856
	T-104	Condenser	CW	2.03×10^{6}	-1.18×10^{4}
		Reboiler	LPS	1.96×10^{4}	1.19×10^{4}
	T-105	Condenser	CW	8.95×10^{5}	-5.19×10^{3}
		Reboiler	MPS	1.49×10^{4}	8.44×10^{3}
	T-106	Condenser	CW	3.19×10^{5}	-1.85×10^{3}
		Reboiler	HPS	6.45×10^{3}	3.08×10^{3}

Scenario	Unit code	Unit name	Utility type	Utility usage (kg/hr)	Heat duty (kW)
3	T-101	Condenser	CW	4.61×10^5	-2.67×10^3
		Reboiler	HPS	8.66×10^3	4.14×10^3
	T-102	Condenser	CW	3.23×10^4	-187
		Reboiler	HPS	414	198
	T-103	Condenser	CW	1.39×10^5	-806
		Reboiler	HPS	1.66×10^3	793
	T-104	Condenser	CW	5.43×10^5	-3.15×10^3
		Reboiler	LPS	5.23×10^3	3.18×10^3
	T-105	Condenser	CW	2.33×10^5	-1.35×10^3
		Reboiler	MPS	3.87×10^3	2.19×10^3
	T-106	Condenser	CW	8.02×10^4	-465
		Reboiler	HPS	1.63×10^3	777
4	T-101	Condenser	CW	5.40×10^5	-3.13×10^3
		Reboiler	HPS	9.19×10^3	4.39×10^3
	T-102	Condenser	CW	3.57×10^4	-207
		Reboiler	HPS	439	209
	T-103	Condenser	CW	1.41×10^5	-818
		Reboiler	HPS	1.74×10^3	830
	T-104	Condenser	CW	7.51×10^5	-4.35×10^3
		Reboiler	LPS	7.21×10^3	4.39×10^3
	T-105	Condenser	CW	2.92×10^5	-1.69×10^3
		Reboiler	MPS	4.81×10^3	2.72×10^3
	T-106	Condenser	CW	9.15×10^4	-530
		Reboiler	HPS	1.87×10^3	895

D.3 Reactive distillation column configuration

Table D3. Configuration of the reactive distillation column, T-101.

Property	Unit	Scenario 1			Scenario 2		
		Rectifying	Reactive	Stripping	Rectifying	Reactive	Stripping
Section starting stage	-	2	7	36	2	7	36
Section ending stage	-	6	35	39	6	35	39
Internal type	-	Trayed	Packed	Trayed	Trayed	Packed	Trayed
Tray/Packing type	-	Sieve	Mellapak	Sieve	Sieve	Mellapak	Sieve
Tray spacing	m	0.610	-	0.610	0.610	-	0.610
HETP	m	-	0.600	-	-	0.600	-
Section diameter	m	2.08	1.86	2.47	2.24	1.76	1.71
Section height	m	3.05	17.4	2.44	3.05	17.4	2.44

Property	Unit	Scenario 3			Scenario 4		
		Rectifying	Reactive	Stripping	Rectifying	Reactive	Stripping
Section starting stage	-	2	7	36	2	7	36
Section ending stage	-	6	35	39	6	35	39
Internal type	-	Trayed	Packed	Trayed	Trayed	Packed	Trayed
Tray/Packing type	-	Sieve	Mellapak	Sieve	Sieve	Mellapak	Sieve
Tray spacing	m	0.610	-	0.610	0.610	-	0.610
HETP	m	-	0.600	-	-	0.600	-
Section diameter	m	1.09	1.04	1.35	1.19	1.07	1.43
Section height	m	3.05	17.4	2.44	3.05	17.4	2.44

APPENDIX E ECONOMIC ANALYSIS RESULTS

Table E1. Economic analysis parameters

Name	Units	Value
Number of weeks per period	Weeks/year	52
Number of periods for analysis	-	20
Tax rate	%/year	20
Interest rate	%/year	20
Economic life of project	year	20
Salvage value	%	20
Project capital escalation	%/year	5
Products escalation	%/year	5
Operating and maintenance labor escalation	%/year	3.5
Utilities escalation	%/year	3
Material indexing	-	1.14
Length of start-up period	Weeks	20
Operating hours per period	Hours/year	8,000

Table E2. Economic results

Items	Units	Scenario			
		1	2	3	4
Total capital cost	USD	2.26×10^7	2.72×10^7	1.60×10^7	1.85×10^7
Total operating cost	USD/y	1.72×10^8	1.68×10^8	1.37×10^8	1.58×10^8
Total raw materials cost	USD/y	1.43×10^8	1.38×10^8	1.20×10^8	1.37×10^8
Total utilities cost	USD/y	1.46×10^7	1.61×10^7	5.36×10^6	7.36×10^6
Total product sales	USD/y	1.74×10^8	1.74×10^8	1.74×10^8	1.74×10^8
Net present value	USD	7.82×10^6	2.48×10^7	1.76×10^8	7.72×10^7
Internal rate of return	%	21.3	24.1	74.6	37.9
Payout period	y	17.2	13.2	3.41	6.79