

**ESTUDIO DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA, BUTANOL Y
ETANOL INTEGRANDO FERMENTACIÓN Y EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO
CON MEMBRANAS, A TRAVÉS DE MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN**

LAURA MARCELA AGUILAR DUARTE

TATIANA LIZETH PINTO ESPITIA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

**ESTUDIO DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA, BUTANOL Y
ETANOL INTEGRANDO FERMENTACIÓN Y EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO
CON MEMBRANAS, A TRAVÉS DE MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN**

**LAURA MARCELA AGUILAR DUARTE
TATIANA LIZETH PINTO ESPITIA**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar por el título de
Ingeniero Químico**

Director

**Prof. CARLOS JESÚS MUVDI NOVA
Ingeniero Químico, M.Sc., Ph. D.**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA**

2017

A Dios, fuerza motriz del cosmos y mi faro de luz en la oscuridad.
He confiado en Él y ha hecho grandes cosas en mí.

A mi mamá, mi fuente de amor eterno.

A Tati, amiga, hermana y comadre incondicional.

A Pedro, mi bendición, mi paz y tranquilidad.

Laura Marcela Aguilar Duarte

A Dios, por ser fortaleza y refugio en tiempo de necesidad, y antorcha que guía e ilumina en tiempo de esperanza.

A mis papás y a mi hermano, que con su ejemplo de vida me han motivado, y con su apoyo incondicional me han permitido alcanzar mis sueños.

A Lauri, la mejor compañera de tesis, y sobre todas las dificultades una increíble amiga.

A Gaby, Meli y Paulita, por ser mis cómplices y amigas en todo momento.

A mi cielo, por llenarme de calma y compartir juntos las alegrías de nuestras metas cumplidas.

Tatiana Lizeth Pinto Espitia

AGRADECIMIENTOS

A la **Universidad Industrial de Santander**, nuestra *alma máter*, por contribuir en nuestra formación integral.

Al profesor **Carlos Jesús Muvdi Nova**, por su entrega, dedicación y compromiso incondicional en el desarrollo de este proyecto, y por enseñarnos que los grandes logros nacen de grandes sacrificios.

Al **Centro de Investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos (CICTA) y su grupo de profesionales**, por el apoyo brindado durante la fase experimental de esta investigación.

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	19
1. OBJETIVOS	25
1.1. OBJETIVO GENERAL	25
1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	25
2. METODOLOGÍA.....	26
2.1. DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LOS COEFICIENTES DE PARTICIÓN Y SELECCIÓN DEL SOLVENTE A EMPLEAR EN LA ELLM	27
2.2. PLANTEAMIENTO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS QUE DESCRIBAN LA PRODUCCIÓN POR FERMENTACIÓN Y LA SEPARACIÓN POR ELLM DE LOS COMPUESTOS ABE	27
2.3. ANÁLISIS POR SIMULACIÓN DE LA FERMENTACIÓN Y LA SEPARACIÓN, A TRAVÉS DE MATLAB®.....	29
2.4. EVALUACIÓN POR SIMULACIÓN DE LAS ETAPAS DE TRATAMIENTO DE LOS PERMEADOS OBTENIDOS POR ELLM, A TRAVÉS DE ASPEN PLUS®	30
3. RESULTADOS Y ANÁLISIS.....	32
3.1. DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LOS COEFICIENTES DE PARTICIÓN Y SELECCIÓN DEL SOLVENTE A EMPLEAR	32
3.2. PLANTEAMIENTO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS PARA DESCRIBIR LA PRODUCCIÓN POR FERMENTACIÓN Y LA SEPARACIÓN MEDIANTE ELLM	34

3.3. ANÁLISIS POR SIMULACIÓN INTEGRANDO LA FERMENTACIÓN Y LA SEPARACIÓN A TRAVÉS DE MATLAB®	39
3.4. EVALUACIÓN POR SIMULACIÓN DE LAS ETAPAS DE TRATAMIENTO DE LOS PERMEADOS OBTENIDOS POR ELLM, A TRAVÉS DE ASPEN PLUS® ...	46
4. CONCLUSIONES	49
5. RECOMENDACIONES	51
CITAS BIBLIOGRÁFICAS.....	52
BIBLIOGRAFÍA	56
ANEXOS	60

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Métodos alternativos para separar los productos de la fermentación ABE.....	21
Tabla 2. Coeficientes de partición y temperaturas de ebullición de diferentes solventes.....	22
Tabla 3. Trabajos desarrollados en el CICTA-UIS sobre la técnica ELLM.....	23
Tabla 4. Consideraciones fenomenológicas para los modelos matemáticos.....	28
Tabla 5. Diseño factorial para las variables de entrada en la ELLM.....	29
Tabla 6. Diseño factorial para la fermentación y ELLM integradas.....	30
Tabla 7. Coeficientes de partición (P) evaluados a 25 y 40 °C, y concentraciones iniciales en la fase acuosa (FA) de A=8,6 y 0,860 g/L, B= 20 y 2 g/L y E= 2,48 y 0,248 g/L, en niveles altos (Ca) y bajos (Cb), respectivamente. Tiempo de prueba de 24 h.....	32
Tabla 8. Balances para el modelamiento de la fermentación ABE en <i>Batch</i> y en continuo.....	34
Tabla 9. Modelo cinético para la fermentación ABE.....	35
Tabla 10. Sistema de ecuaciones para el modelamiento de la extracción líquido - líquido con membranas utilizando un módulo membranario <i>plate and frame</i>	37
Tabla 11. Balances para el modelamiento de la fermentación ABE en modo recirculación.....	39
Tabla 12. Condiciones de la alimentación al destilador y resultados de la simulación utilizando los métodos DSTWU y Radfrac.....	47

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Ruta metabólica generalizada de la fermentación ABE en <i>Clostridium acetobutylicum</i> a partir de glucosa.....	20
Figura 2. Diagrama metodológico.....	26
Figura 3. (a) Fermentación en <i>Batch</i> , (b) Fermentación en continuo, (c) ELLM en continuo, (d) Fermentación y ELLM integradas.....	28
Figura 4. (a) Representación de la teoría de resistencias en serie entre fase acuosa (FA), membrana y fase solvente (FS) y (b) Vista superior de la membrana plana dividida en elementos diferenciales.....	35
Figura 5. Vista lateral del módulo de ELLM con (a) una membrana, (b) dos membranas, (c) cuatro membranas y (d) ocho membranas.....	36
Figura 6. Proceso de fermentación ABE y ELLM integrados.....	38
Figura 7. Concentración de acetona (<i>A</i>), butanol (<i>B</i>), etanol (<i>E</i>), ácido acético (<i>AA</i>) y ácido butírico (<i>AB</i>) en el fermentador, en función de la velocidad de dilución (<i>D</i>) para una concentración de sustrato en la alimentación (<i>S</i> ₀) de (a) 20 g/L y (b) 60 g/L.....	40
Figura 8. Diagramas de Pareto para el estudio de influencia de Q_{ac} , T , ε , δ y B_{ac} sobre (a) $k_{ac,B}$, (b) $k_{st,B}$, (c) $k_{m,B}$ y (d) N_B en la ELLM para una membrana.....	41
Figura 9. Flux y flujo total de permeado de butanol en el módulo de ELLM en continuo a 37 °C con 1, 2, 4 y 8 membranas, para Bac de 8,2 g/L (a,c) y 10,4 g/L (b,d), y Q_{ac} de 0,2 y 1 L/min.....	42
Figura 10. Diagrama de flujo para la resolución numérica del modelo matemático integrado de la fermentación y ELLM en estado transitorio.....	43

Figura 11. Perfiles de concentración de acetona (A), butanol (B) y etanol (E) en el fermentador y tanque de fase solvente, y ácido acético (AA) y ácido butírico (AB) en el fermentador, para una S_0 de 70 g/L y dos D (a) $0,1 \text{ h}^{-1}$ y (b) $0,3 \text{ h}^{-1}$. En gris la fermentación *Batch* sin integrar y en blanco la fermentación y ELLM integradas en continuo.....45

Figura 12. Diagrama del proceso integrando fermentación ABE, ELLM y la etapa de recirculación del solvente empleado en la extracción.....46

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
Anexo A. Desarrollo de los balances de la fermentación con recirculación en continuo.....	60
Anexo B. Código en Matlab® de la simulación integrada	61
Anexo C. Análisis de influencia del proceso integrado.....	68

NOMENCLATURA

Índices

<i>A</i>	<i>Concentración de acetona [g/L]</i>
<i>AA</i>	<i>Concentración de ácido acético [g/L]</i>
<i>AB</i>	<i>Concentración de ácido butírico [g/L]</i>
<i>B</i>	<i>Concentración de butanol [g/L]</i>
<i>C</i>	<i>Concentración [g/L]</i>
<i>D</i>	<i>Velocidad de dilución [h^{-1}]</i>
<i>Di</i>	<i>Difusividad [m^2/s]</i>
<i>dh</i>	<i>Diámetro hidráulico [m]</i>
<i>e</i>	<i>Espesor compartimiento [m]</i>
<i>E</i>	<i>Concentración de etanol [g/L]</i>
<i>h</i>	<i>Ancho de la membrana [m]</i>
<i>k</i>	<i>Coefficiente de transferencia de masa [m/s]</i>
<i>l</i>	<i>Longitud de la membrana [m]</i>
<i>L</i>	<i>Relación de recirculación de fase acuosa (adimensional)</i>
<i>m</i>	<i>Particiones de la membrana en el espacio (adimensional)</i>
<i>M</i>	<i>Flujo másico [kg/s]</i>
<i>MM</i>	<i>Masa molar [kg/kmol]</i>
<i>n</i>	<i>Flujo de soluto permeado [kg/s]</i>
<i>N</i>	<i>Flux de soluto permeado [$kg/m^2 \cdot s$]</i>
<i>P</i>	<i>Coefficiente de partición (adimensional)</i>
<i>PR</i>	<i>Productividad [g/L · h]</i>
<i>Q</i>	<i>Caudal [m^3/s]</i>
<i>r</i>	<i>Velocidad de reacción [$kg/m^3 \cdot s$]</i>
<i>R</i>	<i>Relación de purga (adimensional)</i>
<i>RR</i>	<i>Resistencia a la transferencia de masa [s/m]</i>
<i>S</i>	<i>Concentración de sustrato [g/L]</i>
<i>So</i>	<i>Concentración de sustrato en la alimentación [g/L]</i>
<i>t</i>	<i>Tiempo [h]</i>

<i>T</i>	<i>Temperatura [°C]</i>
<i>u</i>	<i>Viscosidad [Pa · s]</i>
<i>v</i>	<i>Velocidad [m/s]</i>
<i>V</i>	<i>Volumen [L]</i>
<i>VM</i>	<i>Volumen molar [m³/kmol]</i>
<i>W</i>	<i>Fracción másica</i>
<i>X</i>	<i>Concentración de biomasa [g/L]</i>
<i>Xs</i>	<i>Conversión de sustrato [g/L]</i>
<i>z</i>	<i>Número de particiones en el tiempo (adimensional)</i>

Subíndices

<i>A</i>	<i>Referente a acetona</i>
<i>B</i>	<i>Referente a butanol</i>
<i>E</i>	<i>Referente a etanol</i>
<i>AA</i>	<i>Referente a ácido acético</i>
<i>AB</i>	<i>Referente a ácido butírico</i>
<i>X</i>	<i>Referente a biomasa</i>
<i>S</i>	<i>Referente a sustrato</i>
<i>ac</i>	<i>Referente a fase acuosa</i>
<i>st</i>	<i>Referente a fase solvente</i>
<i>m</i>	<i>Referente a membrana</i>
<i>i</i>	<i>Referente a la inhibición</i>
<i>sto</i>	<i>Referente al soluto</i>
<i>w</i>	<i>Referente al agua</i>

Superíndices

<i>eq</i>	<i>Equilibrio</i>
-----------	-------------------

Letras griegas

δ	<i>Espesor</i>
ε	<i>Porosidad</i>

μ	<i>Velocidad específica de crecimiento celular</i>
ρ	<i>Densidad</i>
α	<i>Relación de recirculación de acetona</i>
β	<i>Relación de recirculación de butanol</i>
γ	<i>Relación de recirculación de etanol</i>
τ	<i>Tortuosidad</i>

Números adimensionales

Sh	<i>Sherwood</i>
Sc	<i>Schmidt</i>
Re	<i>Reynolds</i>

RESUMEN

TÍTULO: ESTUDIO DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ACETONA, BUTANOL Y ETANOL INTEGRANDO FERMENTACIÓN Y EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO CON MEMBRANAS A TRAVÉS DE MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN*

AUTORES: Laura Marcela Aguilar Duarte – Tatiana Lizeth Pinto Espitia**

PALABRAS CLAVE: Fermentación acetobutílica, Extracción líquido-líquido con membranas, Modelamiento matemático, Simulación.

DESCRIPCIÓN:

El proceso tradicional para obtener butanol como biocombustible se da con la fermentación acetobutílica, donde además se produce acetona y etanol. Esta fermentación está limitada esencialmente por la inhibición de los productos en los microorganismos. Como alternativa de solución, en este trabajo se propuso una extracción líquido-líquido con membranas (ELLM) integrado a la fermentación, para separar de forma continua los productos (acetona, butanol y etanol), y evitar que el proceso se detenga.

Se evaluaron los coeficientes de partición (P) de tres solventes preseleccionados para extraer acetona, butanol y etanol, y se obtuvieron los mayores coeficientes P al emplear octanol, con valores hasta 35,9 veces mayores que los de solventes empleados en trabajos anteriores. Para el modelamiento matemático, se propusieron los modelos en estado transitorio de la fermentación ABE y la ELLM de forma individual e integrada. El modelo integrado estuvo conformado por un sistema de 14 ecuaciones diferenciales, 31 ecuaciones algebraicas, 45 variables y 26 parámetros, y describió la fermentación acoplada a la extracción en continuo, después de un arranque de la fermentación en *Batch*.

Con base en esto, se desarrolló una programación numérica en el *software* Matlab® para simular el proceso y verificar los modelos planteados. Se estableció que los resultados de la simulación eran coherentes con la literatura y las ecuaciones planteadas en los modelos, según análisis de influencia planteados en el *software* Statgraphics Centurion XVI®. Se simuló la recuperación del solvente mediante una destilación *Batch* en el *software* Aspen Plus®. Se obtuvo una pureza de octanol en fondos de 0,999 p/p, y de compuestos ABE en el destilado de 0,997 p/p, después de 4,1 h de operación, con un consumo energético entre 8,3 y 11,0 MJ/kg de butanol, con lo cual es posible reutilizar el solvente y disminuir los costos del proceso.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Centro de Investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos. Director: Carlos Jesús Muvdi Nova. Ingeniero Químico, M.Sc., Ph.D.

ABSTRACT

TITLE: STUDY OF THE PRODUCTION PROCESS OF ACETONE, BUTANOL AND ETHANOL INTEGRATING FERMENTATION AND LIQUID-LIQUID EXTRACTION WITH MEMBRANES, THROUGH MATHEMATICAL MODELLING AND SIMULATION*

AUTHORS: Laura Marcela Aguilar Duarte – Tatiana Lizeth Pinto Espitia **

KEYWORDS: Acetobutylic fermentation, Liquid-liquid membrane contactor, Mathematic modelling, Simulation.

DESCRIPTION:

The traditional process for obtaining butanol as a biofuel is through acetobutylic fermentation, where acetone and ethanol are also produced. This fermentation is essentially limited by product inhibition of microorganisms. As a possible solution, a liquid-liquid membrane contactor (LLMC) integrated with fermentation was proposed to separate continuously the products (acetone, butanol and ethanol), preventing the inhibition of the process.

The partition coefficients (P) of three preselected solvents to extract acetone, butanol and ethanol were evaluated, and the highest P coefficients were obtained using octanol, with values up to 35.9 times higher than solvents used in previous works. For the mathematical modeling, the transient models of the ABE fermentation and the LLMC were proposed individually and under the integrated form. The integrated model consisted of a system of 14 differential equations, 31 algebraic equations, 45 variables and 26 parameters. This model described the fermentation coupled to the continuous extraction, considering a Batch configuration start.

Based on this, a numerical programming was developed in the Matlab® software to simulate and to verify the proposed models of the process. Using Statgraphics Centurion XVI® influence analysis, it was established that the simulation results were consistent with literature and model equations. The recuperation of the solvent by Batch distillation was simulated through Aspen Plus®. A bottoms octanol purity of 0.999 w/w, and distillate ABE compounds of 0.997 w/w, were obtained, after 4.1 h of operation, with an energy consumption between 8.3 and 11.0 MJ/kg of butanol, thereby showing the possibility to reuse the solvent and reduce the process costs.

* Undergraduate Project

** Physical and Chemical Engineering's Faculty. School of Chemical Engineering. Food Science and Technology Research Center. Advisor: Carlos Jesús Muvdi Nova, Chemical Engineer, M.Sc., Ph.D.

INTRODUCCIÓN

La creciente preocupación a nivel mundial por la protección y conservación del medio ambiente, sumado al interés por reducir la dependencia del petróleo, ha promovido en las últimas dos décadas el desarrollo de los biocombustibles [1]. Entre éstos se destaca el n-butanol, que además de su uso como aditivo de la gasolina, puede ser empleado como materia prima básica en la producción de pinturas, polímeros, cosméticos, detergentes y productos farmacéuticos [2].

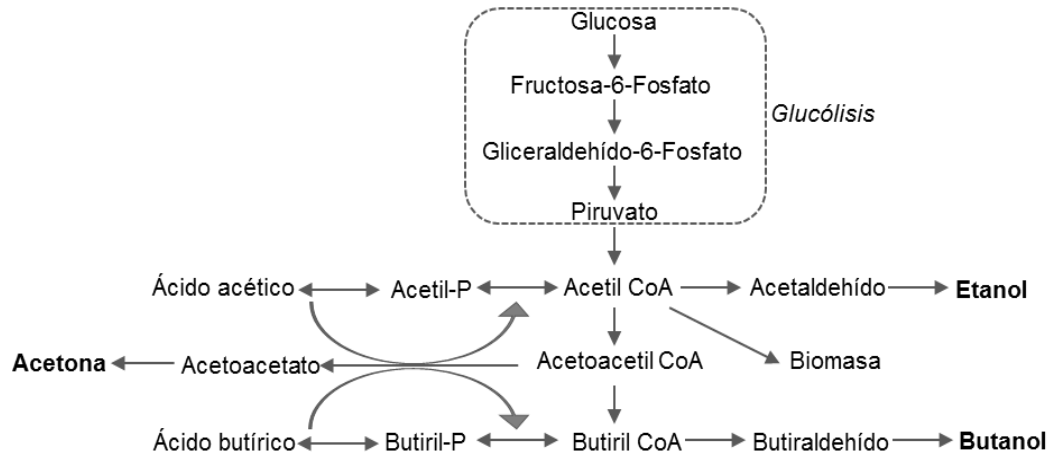
Actualmente, el etanol es el oxigenante de la gasolina más empleado [3]; sin embargo, el n-butanol presenta ventajas significativas sobre éste, pues posee propiedades fisicoquímicas más similares a la gasolina, lo cual permite que pueda ser mezclado con ésta en cualquier proporción [4].

La producción de n-butanol como biocombustible se lleva a cabo con la fermentación acetobutílica de azúcares derivados de biomasa, en la cual se produce también acetona y etanol en menor proporción (fermentación ABE). Las bacterias comúnmente usadas para esta fermentación son del género *Clostridium*, destacadas por su capacidad de metabolizar un amplio rango de carbohidratos [4,5]. Entre éstas se destaca la *Clostridium acetobutylicum*, bacteria gram-positiva, mesófila y anaerobia, considerada una de las especies más prominentes en la industria de los biocombustibles y la más estudiada de su género [6].

Clostridium acetobutylicum asimila como sustrato diferentes azúcares, los hidroliza y metaboliza hasta glucosa, a partir de la cual se da la fermentación en dos fases, a una temperatura óptima de 37°C. En la primera fase, o acidogénesis, la bacteria crece y produce ácido acético y ácido butírico, lo que hace disminuir el pH desde 6,8-7 hasta 3,9-4. En este punto se da el *acid break* e inicia la segunda fase, o solventogénesis, en la cual la bacteria detiene su crecimiento y la producción de ácidos, los cuales son re-asimilados para producir acetona, butanol y etanol en una

proporción másica típica de 3:6:1 respectivamente, aumentando así el pH [1,7,8,9]. La ruta metabólica de fermentación ABE en *Clostridium acetobutylicum* a partir de glucosa como fuente de carbono se muestra en la Figura 1.

Figura 1. Ruta metabólica generalizada de la fermentación ABE en *Clostridium acetobutylicum* a partir de glucosa.



Sin embargo, la implementación de este proceso a escala industrial ha sido limitado por el alto costo del sustrato y la toxicidad de los productos de la fermentación en los microorganismos, principalmente butanol y ácido butírico, cuando la suma de las concentraciones ABE llega a 20 g/L, lo cual ocurre cuando el butanol alcanza 13g/L [9,10]. Por esta razón, la fermentación se detiene al alcanzar estas concentraciones, lo que ocasiona baja productividad volumétrica (<0,5 g/L·h), bajo rendimiento del producto (<35%) y baja concentración del producto (<20 g/L), lo cual causa altos costos de recuperación [2,11].

Como alternativas de solución a la inhibición por producto, se encuentra la modificación genética del microorganismo para que sea más tolerante [4], y la implementación de métodos de separación para remover los productos mientras la fermentación sigue en curso, y así mantener su concentración por debajo del nivel de inhibición [2]. Para este último caso, la técnica convencional de destilación del caldo de fermentación no resulta viable, puesto que en ella se consume incluso más

energía que la contenida en los productos separados, además de que los microorganismos no resisten las temperaturas de esta operación [5], por lo cual se han estudiado diferentes métodos alternativos que sean más rentables. Las ventajas y desventajas de algunos de ellos se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Métodos alternativos para separar los productos de la fermentación ABE.

Técnica	Ventajas	Desventajas
Pervaporación ^[4]	<ul style="list-style-type: none"> • Menor requerimiento energético que en la destilación convencional. • Efectiva con fines de concentración. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ensuciamiento de membrana con moléculas adheridas a la superficie. • Bajos flux de permeado. • Baja productividad.
Destilación con membranas ^[12]	<ul style="list-style-type: none"> • Menor temperatura de operación que en la destilación convencional. • Mayor permeabilidad que en la pervaporación. • Efectiva con fines de separación. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ensuciamiento de la membrana. • Bajos factores de concentración. • Solo retira productos volátiles.
Extracción líquido – líquido (ELL) ^[4]	<ul style="list-style-type: none"> • Alta capacidad de extracción. • Alta selectividad en la separación de butanol/agua. 	<ul style="list-style-type: none"> • Contaminación de la fase acuosa con solvente, lo que puede ser tóxico para los microorganismos. • Creación de emulsiones.
Extracción líquido – líquido con contactores a membrana (ELLM) ^[13]	<ul style="list-style-type: none"> • Evita formación de emulsiones y el solvente no contamina fase acuosa. • Menores pérdidas de solvente que en la ELL. • Mayor selectividad y menor requerimiento energético que en la pervaporación. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ensuciamiento de la membrana. • Resistencia adicional a la transferencia de masa (membrana) comparada con la ELL. • Poca investigación en esta técnica.

De estas técnicas, una de gran interés es la tecnología conocida como extracción líquido-líquido con membranas (ELLM), la cual ha permitido recuperar butanol y acetona de mezclas ABE [11,13]. En esta técnica la membrana actúa como una barrera no selectiva que separa dos fluidos inmiscibles, al mismo tiempo que los mantiene en contacto por medio de sus poros [14], lo cual evita que el solvente entre en contacto con los microorganismos de la fase acuosa. La fuerza motriz que

asegura la transferencia de masa es la diferencia de concentraciones del soluto a extraer en ambas fases.

Para esta técnica se debe seleccionar un solvente que sea afín con la membrana para que no la deteriore, y que tenga alta volatilidad relativa con el compuesto a extraer para facilitar su posterior separación [11]. Además debe poseer un alto coeficiente de partición (P), variable que relaciona las concentraciones en equilibrio de un soluto de interés, entre dos fases inmiscibles a una temperatura dada [15], y que es una medida de la afinidad del compuesto para las dos fases. Para el presente trabajo, está representado por la ecuación (1).

$$P = \frac{[\text{Compuesto ABE}]_{\text{fase solvente}}^{eq}}{[\text{Compuesto ABE}]_{\text{fase acuosa}}^{eq}} \quad (1)$$

Según la literatura, los solventes utilizados para la recuperación de compuestos ABE son esencialmente alcoholes y aceites. Los coeficientes de partición de algunos de éstos, calculados por medio de ELL convencional, se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Coeficientes de partición y temperaturas de ebullición de diferentes solventes. *Flash point. (Temperatura de ebullición del butanol = 117,6 °C [18])

Solvente	Coeficiente P	Temperatura de la extracción [°C]	Temperatura de ebullición solvente [°C]
Aceite de palma	P _B = 0,90 [16] P _A = 0,22 [16] P _E = 0,05 [16]	30	162* [21]
1-Octanol	P _B = 10 [18] P _B = 9,95 [19]	37	195 [17]
	P _A = 0,81 [17] P _E = 0,66 [17]	25	
1-Decanol	P _B = 8 [18] P _B = 7,17 [19]	37	232,8 [17]
1-Dodecanol	P _B = 6 [18]	37	258,9 [17]
	P _B = 5,52 [20]	30	

Es importante mencionar los trabajos sobre ELLM realizados por López *et al.* (2014) y Ballesteros & Gutiérrez (2015) en el Grupo de Investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos de la UIS (CICTA-UIS), que se muestran en la Tabla 3.

Tabla 3. Trabajos desarrollados en el CICTA-UIS sobre la técnica ELLM.

		López <i>et al.</i> (2014)	Ballesteros & Gutiérrez (2015)
Tipo de proceso		<i>Batch</i> difusivo	<i>Batch</i> convectivo
Condiciones de operación	Tipo de solución	Soluciones ABE preparadas	Soluciones ABE preparadas
	Temperatura	30 - 42 °C	20 - 50 °C
	Concentración inicial de butanol	1,65 – 20 kg·m ⁻³	13 - 20 kg·m ⁻³
Tipo de membrana		Membranas orgánicas de politetrafluoroetileno (PTFE)	Módulo de membranas de fibra hueca comercial (1.7 x 5.5 MiniModule™)
Solvente	Tipo	Tolueno	Hexano
	Coefficiente de partición	Acetona: 0,761 Butanol: 0,998	Acetona: 0,128 Butanol: 0,218
Flux de permeado		Butanol: 0,0447 kg·m ⁻² ·h ⁻¹ Acetona: 0,0174 kg·m ⁻² ·h ⁻¹ Etanol: Despreciable	No se reportan

En el estudio de López *et al.* (2014) se utilizó tolueno como solvente al tener un coeficiente P para butanol mayor al de otros solventes comerciales evaluados (éter de petróleo y hexano), aunque éste posee una temperatura de ebullición muy similar a la del butanol, lo cual dificultaría su posterior separación. En el trabajo de Ballesteros & Gutiérrez (2015) no se implementó una técnica posterior a la ELLM en la que se recuperara la fase solvente, por lo cual ésta se recirculó hasta alcanzar el equilibrio y detener el proceso; y, por otra parte, fue difícil garantizar la transferencia de masa en todo el lúmen de fibras debido al alto empaquetamiento, por lo cual recomendaron implementar un módulo *plate and frame*, con el que se evitaría este inconveniente. En ambos casos se desarrolló un modelo matemático

de la ELLM para sus respectivos procesos. Sin embargo, en estos trabajos ni en los demás reportados en la literatura sobre ELLM, como Groot *et al.* (1990) y Shukla *et al.* (1989), se ha empleado un solvente que recupere butanol, acetona y etanol simultáneamente mediante esta técnica, para así aprovechar éstos dos últimos como subproductos valiosos.

Por otra parte, tampoco se ha evaluado la recuperación del solvente después de la extracción, lo cual reduciría los costos del proceso. Para llevar a cabo esto, las heurísticas de diseño de procesos recomiendan la destilación, ya que es el medio menos costoso para separar mezclas de líquidos, siempre y cuando las volatilidades relativas de los compuestos a separar (compuestos ABE y solvente) sean mayores a 1,1 [22]. Finalmente, no se han reportado en la literatura trabajos sobre simulación del proceso de producción de compuestos ABE por fermentación y su extracción con ELLM de forma integrada, herramienta que facilitaría el análisis del proceso al poder realizar un número ilimitado de experimentos, con menor gasto de tiempo y dinero que si los mismos se desarrollan experimentalmente.

Por lo tanto, esta propuesta buscó estudiar por medio de modelamiento matemático y simulación la producción de butanol, acetona y etanol por fermentación, y su posterior separación mediante la técnica ELLM. Además, teniendo en cuenta que es importante la recuperación del solvente desde el punto de vista económico, se buscó evaluar su separación de los compuestos ABE en una etapa posterior para recircularlo al proceso, buscando implementar experimentalmente este proceso a escala laboratorio en futuros trabajos.

1. OBJETIVOS

1.1. Objetivo general

Estudiar mediante modelamiento matemático y simulación el proceso de producción de acetona, butanol y etanol por fermentación acetobutílica y su separación por extracción líquido-líquido con membranas (ELLM).

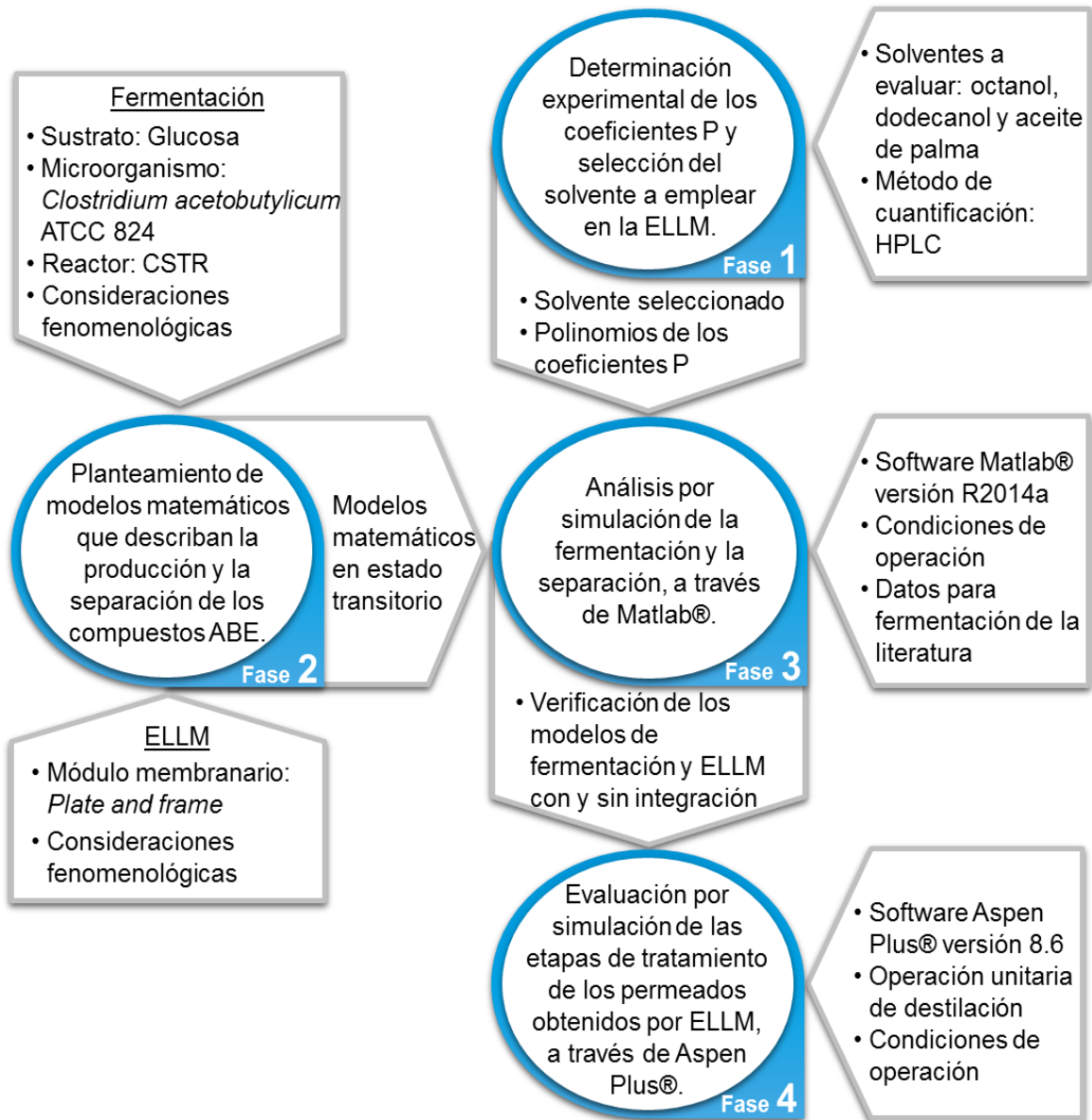
1.2. Objetivos específicos

- Estudiar solventes afines y con alta volatilidad relativa respecto a los compuestos ABE, y seleccionar el que posea mayores coeficientes de partición para ser empleado en la técnica ELLM.
- Plantear los modelos matemáticos que describan la producción de acetona, butanol y etanol en la fermentación ABE, y su separación por ELLM al integrar las dos etapas en estado transitorio.
- Analizar a través de simulación la fermentación y la ELLM, con y sin integración, por medio del *software* Matlab®.
- Evaluar las etapas de tratamiento de los permeados obtenidos por ELLM a través de destilación y la recirculación del solvente empleado, en estado transitorio, por medio del *software* Aspen Plus®.

2. METODOLOGÍA

La metodología planteada para este proyecto se muestra en la Figura 2.

Figura 2. Diagrama metodológico.



2.1. Determinación experimental de los coeficientes de partición y selección del solvente a emplear en la ELLM.

En esta fase se determinaron experimentalmente los coeficientes P de tres solventes pre-seleccionados, 1-dodecanol, 1-octanol y aceite de palma, con el fin de escoger uno de ellos para la ELLM. Los alcoholes fueron pre-seleccionados debido a sus altos coeficientes P y bajas volatilidades relativas con butanol reportados en la literatura, y el aceite debido a la buena solubilidad de los compuestos ABE en el mismo, observada en pruebas preliminares, y a su alta disponibilidad en el mercado nacional.

Las pruebas se realizaron poniendo en contacto 4 mL de cada solvente (sin solutos) con 4mL de fase acuosa a dos niveles de concentración de acetona, butanol y etanol, 5,93, 20 y 2,48 [g/L], respectivamente, para el nivel superior, y 0,593, 2 y 0,248 [g/L] para el inferior, siguiendo la metodología de López *et al.* (2014); y dos niveles de temperatura, 25 y 40°C, durante 24 h. Seguido de esto, se midió la concentración de los compuestos ABE en cada fase acuosa por HPLC con duplicado, y se calculó su respectiva concentración en cada fase solvente por balance de masa.

2.2. Planteamiento de los modelos matemáticos que describan la producción por fermentación y la separación por ELLM de los compuestos ABE.

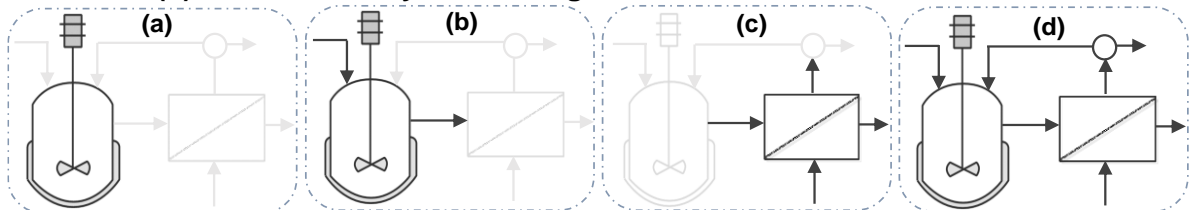
En esta fase se establecieron las ecuaciones para la fermentación y la ELLM. El fermentador considerado fue un CSTR, y el módulo membranario para ELLM fue de tipo *plate and frame*. Las consideraciones planteadas se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4. Consideraciones fenomenológicas para los modelos matemáticos.

Modelo para fermentación	Modelo para ELLM
<ul style="list-style-type: none"> • El reactivo límite es la glucosa [9]. • La fermentación se da en condiciones óptimas de 37°C, pH 4,5 (constantes), y en ausencia de oxígeno [5,9]. • Todas las células son metabólicamente activas y viables [9]. • Los ácidos acético y butírico son metabolitos intermedios y son reducidos a acetona y butanol, respectivamente [5,23]. • Acetona, butanol y etanol también son producidos a partir de sustrato [23]. • El modelo cinético de crecimiento es Monod ajustado con una función de inhibición por butanol y ácido butírico [9]. 	<ul style="list-style-type: none"> • El sistema es isotérmico (37°C) [13]. • La transferencia de masa está descrita por la teoría de resistencias en serie y sólo se da en los poros de la membrana [11,13]. • El equilibrio se alcanza en la interfase y está localizado al lado de la fase acuosa [11]. • Los parámetros de la membrana son constantes en toda su superficie [13]. • La membrana no cambia los coeficientes de partición, y no hay colmatación [11]. • La fase acuosa y solvente son inmiscibles, y son soluciones ideales [11,13]. • El solvente sólo extrae butanol, acetona y/o etanol, no los ácidos [23].

Primero se realizaron por separado los modelos de la fermentación en *Batch* y en continuo, y la ELLM, debido a que todo proceso en continuo tiene un arranque en modo *Batch*. Posteriormente se integraron los modelos al recircular la fase acuosa a la salida del módulo membranario después de la extracción. Esta secuencia para desarrollar los modelos se muestra en la Figura 3. También se analizó para ELLM el modelamiento del sistema considerando usar una, dos, cuatro y ocho membranas.

Figura 3. (a) Fermentación en *Batch*, (b) Fermentación en continuo, (c) ELLM en continuo, (d) Fermentación y ELLM integradas.



2.3. Análisis por simulación de la fermentación y la separación, a través de Matlab®.

En esta fase se realizó primero la validación de los modelos de fermentación. Se compararon los perfiles de concentración obtenidos por simulación, con los datos experimentales reportados en la literatura bajo las mismas condiciones de operación.

Por otra parte, a falta de resultados en la literatura sobre ELLM para extraer acetona, butanol y etanol con octanol en un módulo *plate and frame*, se desarrolló un diseño factorial de dos niveles para estudiar la influencia de las variables operacionales: temperatura (T), caudal de la fase acuosa de alimentación (Q_{ac}), y concentración de butanol en la fase acuosa de alimentación (B_{ac}), y de los parámetros de la membrana: espesor (δ) y porosidad (ε), sobre las variables de salida: coeficientes de transferencia de masa (k_{ac} , k_{st} y k_m) y el flux de permeado (N_B), con el fin de verificar las tendencias obtenidas en la simulación del modelo y compararlas con la fundamentación teórica sobre tecnología con membranas, según los niveles que se muestran en la Tabla 5. Así mismo, se simuló el proceso con una, dos, cuatro y ocho membranas para estudiar su efecto sobre el flux y flujo de permeado.

Tabla 5. Diseño factorial para las variables de entrada en la ELLM.

Factor	Nivel		Justificación
	Alto	Bajo	
T [°C]	40	25	Éste es el rango en el que pueden vivir las bacterias (mesófilas).
Q_{ac} [L/min]	1,15	0,115	El nivel alto corresponde a la velocidad de dilución crítica (para $V_r = 10$ L). El nivel bajo es 10 veces menor.
B_{ac} [g/L]	13	2	El nivel alto es la concentración a partir de la cual ocurre inhibición en la fermentación. El nivel bajo es 6,5 veces menor.
δ [μ m]	480	170	Corresponden al espesor de las membranas planas con y sin soporte, respectivamente, desarrolladas en el CICTA-UIS.
ε	0,84	0,1	El nivel alto es la porosidad de las membranas planas desarrolladas en el CICTA-UIS. El nivel bajo es 8,4 veces menor.

Para el proceso integrado se simuló una fermentación en *Batch* hasta alcanzar una concentración de butanol menor a la de inhibición (B_i), y en ese instante el fermentador se conectó en continuo con la ELLM en modo recirculación. Para verificar este modelo se evaluó la influencia de la velocidad de dilución (\mathcal{D}), la concentración de sustrato en la alimentación (S_0) y la concentración de butanol inicial del proceso en continuo (B_i), sobre la conversión de sustrato (X_s) y la productividad de butanol (PR_B), por medio de un diseño factorial de dos niveles, como se muestra en la Tabla 6.

Tabla 6. Diseño factorial para la fermentación y ELLM integradas.

Factor	Nivel		Justificación
	Alto	Bajo	
\mathcal{D} [h ⁻¹]	0,6	0,06	El nivel alto es cercano a la velocidad de dilución crítica y el nivel bajo es 10 veces menor.
S_0 [g/L]	70	20	Los niveles alto y bajo corresponden al mayor y menor reportados en la literatura para fermentación en continuo.
B_i [g/L]	10,4	8,2	El nivel alto es el 80% de la concentración de inhibición y el bajo es el 63,2% de la misma.

2.4. Evaluación por simulación de las etapas de tratamiento de los permeados obtenidos por ELLM, a través de Aspen Plus®.

En esta fase se estudió la recuperación del solvente utilizado en la ELLM, mediante la operación unitaria de destilación, con el fin de evitar que la fase solvente se sature y el proceso de ELLM se detenga. Las variables evaluadas fueron el tiempo de operación y el consumo energético requerido, para alcanzar una pureza en los fondos de 0,999 p/p de octanol. Con esto se planteó un sistema de recirculación del solvente al módulo de la ELLM, de tal manera que sea posible disminuir los costos del proceso.

Métodos experimentales y de análisis

- *Insumos:* Acetona Merck G.A.; 1-Butanol Merck 99,5% p/p; Etanol Panreac 99,5%v/v; 1-Dodecanol Merck 98,0% p/p; 1-Octanol Merck 99,0% p/p; Aceite de palma Oleoflor.

- *Método de cuantificación compuestos ABE:* Por HPLC, equipo Thermo Dionex Ultimate 3000, inyector automático, columna ICE ICSep-COREGEL 107-H acoplada en un horno a 30°C, detector RI RefractoMax 520 a 30°C, flujo isocrático de 0,6 mL/min y fase móvil solución acuosa de H₂SO₄ 8 mM. El tiempo de análisis de cada muestra fue de 40 min y se siguió la metodología propuesta por López *et al.* (2014).

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1. Determinación experimental de los coeficientes de partición y selección del solvente a emplear.

Los coeficientes de partición (P) obtenidos para los tres solventes evaluados (aceite de palma (AP), 1-octanol (O) y 1-dodecanol (D)) se muestran en la Tabla 7.

Tabla 7. Coeficientes de partición (P) evaluados a 25 y 40 °C, y concentraciones iniciales en la fase acuosa (FA) de A=8,6 y 0,860 g/L, B= 20 y 2 g/L y E= 2,48 y 0,248 g/L, en niveles altos (Ca) y bajos (Cb), respectivamente. Tiempo de prueba de 24 h.

Temperatura [°C]	Niveles de concentración inicial (FA) [g/L]	Solvente	Coeficiente de partición		
			Acetona	Butanol	Etanol
25	Ca	AP	0,2223	0,6358	0,0126
		O	0,7045	6,9397	0,5050
		D	0,5575	4,5724	0,3068
	Cb	AP	0,0488	0,4443	0,0478
		O	0,0833	3,5621	0,2026
		D	0,0747	2,7796	0,0923
40	Ca	AP	0,3342	0,7649	0,0750
		O	0,7234	7,8218	0,5473
		D	0,6009	5,0947	0,3445
	Cb	AP	0,1099	0,5590	0,0540
		O	0,1660	3,7366	0,2357
		D	0,3521	2,9099	0,1852

De los resultados se observa que los mayores coeficientes se encontraron, en todos los casos, para la mayor temperatura y concentración inicial de la FA evaluados, tal como fue reportado por López *et al.* (2014) en sus experimentaciones al emplear éter de petróleo, hexano y tolueno como solventes. Esto puede ser debido a que en el rango evaluado, las fases tienen comportamiento de soluciones no diluidas, por ende la curva de equilibrio líquido-líquido no es lineal sino semiparabólica, haciendo que el coeficiente P no sea constante y aumente con la concentración en equilibrio de la FA.

Por otra parte, los valores obtenidos son del mismo orden de magnitud que los reportados en la literatura para estos solventes, como se mostró en la Tabla 2. Se encontró que estadísticamente las concentraciones de acetona y etanol tienen influencia significativa en los coeficientes P de butanol, por lo tanto se plantea la hipótesis de que existe competición entre los compuestos ABE durante la extracción, y esta puede ser la razón por la cual los valores encontrados experimentalmente de los coeficientes P son menores a los reportados en la literatura, ya que estos últimos fueron calculados al realizar la extracción de cada compuesto individualmente.

El solvente que presentó los coeficientes P más altos para los tres compuestos ABE fue el octanol. Esto puede explicarse por el menor número de carbonos que poseen sus moléculas, comparado con el dodecanol y el aceite de palma, por lo cual tiene mayor afinidad con los compuestos ABE [24]. Es importante resaltar que los coeficientes P obtenidos para octanol-butanol son hasta 7,8 y 35,9 veces mayores que los de los solventes empleados por López *et al.* (2014) y Ballesteros & Gutiérrez (2015), respectivamente; además de que se logró la extracción de etanol con el mismo solvente, lo cual no había sido logrado en estos anteriores trabajos, y que permite la extracción simultánea de los tres compuestos ABE con la técnica ELLM sin usar otra técnica adicional en la etapa de separación.

En base a los resultados obtenidos, en el presente proyecto se escogió el octanol como solvente para la técnica ELLM, y se desarrollaron correlaciones de los coeficientes P en función de la concentración de la fase acuosa de cada compuesto y la temperatura, por medio de una regresión múltiple, las cuales se muestran en la siguiente sección.

3.2. Planteamiento de los modelos matemáticos para describir la producción por fermentación y la separación mediante ELLM.

Se desarrollaron los modelos matemáticos de la fermentación ABE en *Batch* y en continuo, y de la ELLM, de forma individual e integrada. Para el caso de la fermentación, en la Tabla 8 se presentan los balances de masa planteados en estado transitorio para la fermentación ABE en *Batch* y en continuo, donde las variables de entrada son la velocidad de dilución (D) y la concentración de sustrato en la alimentación al fermentador (S_0).

Tabla 8. Balances para el modelamiento de la fermentación ABE en *Batch* y en continuo.

Compuesto	<i>Batch</i>	Continuo
Biomasa (X)	$\frac{dX}{dt} = r_X$ (1)	$\frac{dX}{dt} = -DX + r_X$ (8)
Sustrato (S)	$\frac{dS}{dt} = r_S$ (2)	$\frac{dS}{dt} = D(S_0 - S) + r_S$ (9)
Ácido butírico (AB)	$\frac{dAB}{dt} = r_{AB}$ (3)	$\frac{dAB}{dt} = -DAB + r_{AB}$ (10)
Ácido acético (AA)	$\frac{dAA}{dt} = r_{AA}$ (4)	$\frac{dAA}{dt} = -DAA + r_{AA}$ (11)
Butanol (B)	$\frac{dB}{dt} = r_B$ (5)	$\frac{dB}{dt} = -DB + r_B$ (12)
Acetona (A)	$\frac{dA}{dt} = r_A$ (6)	$\frac{dA}{dt} = -DA + r_A$ (13)
Etanol (E)	$\frac{dE}{dt} = r_E$ (7)	$\frac{dE}{dt} = -DE + r_E$ (14)

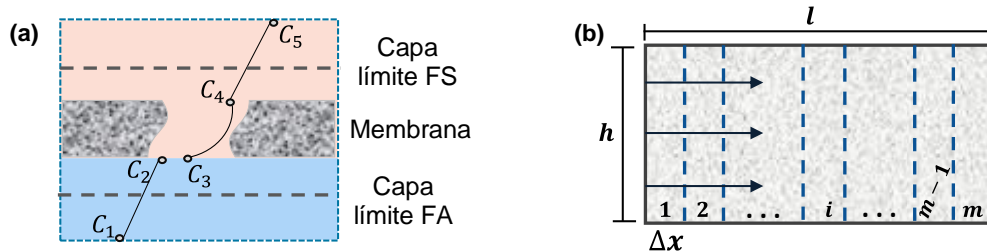
En la Tabla 9 se muestran las velocidades de reacción y sus respectivos parámetros cinéticos, así como la cinética de crecimiento celular representada por el modelo de Monod ajustado con una función de inhibición por butanol y ácido butírico, tomados de Mulchandani (1985), quien los determinó al minimizar las desviaciones entre este modelo cinético y datos experimentales de fermentaciones.

Tabla 9. Modelo cinético para la fermentación ABE.

Velocidades de reacción ^[9] [kg/m ³ ·s]	Biomasa (X)	$r_X = \mu X$ (15)
	Sustrato (S)	$r_S = - \left[\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S + k_1 \frac{S}{k_S + S} \frac{AB}{k_{AB} + AB} + k_2 \frac{S}{k_S + S} \frac{AA}{k_{AA} + AA} \right] X$ (16)
	Ácido butírico (AB)	$r_{AB} = \left[Y_{AB,S} \left(\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S \right) - k_6 \frac{S}{k_S + S} \frac{AB}{k_{AB} + AB} \right] X$ (17)
	Ácido acético (AA)	$r_{AA} = \left[Y_{AA,S} \left(\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S \right) - k_9 \frac{S}{k_S + S} \frac{AA}{k_{AA} + AA} \right] X$ (18)
	Butanol (B)	$r_B = \left[Y_{B,S} \left(\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S \right) + k_{14} \frac{S}{k_S + S} \frac{AB}{k_{AB} + AB} \right] X$ (19)
	Acetona (A)	$r_A = \left[Y_{A,S} \left(\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S \right) + k_{15} \frac{S}{k_S + S} \frac{AA}{k_{AA} + AA} \right] X$ (20)
	Etanol (E)	$r_E = Y_{E,S} \left[\frac{\mu}{Y_{XS}} + m_S \right] X$ (21)
Modelo cinético de crecimiento ^[9]	$\mu = \frac{\mu_m S}{k_S + S} * f(I)$ $f(I) = e^{-0,01(B+AB)}; \quad 0 < B + AB < 8$ $f(I) = -0,153(B + AB) + 2,16; \quad 8 < B + AB < 13,9$	
Parámetros cinéticos ^[9]	$\mu_m = 9,72 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}; \quad k_S = 3,81 \text{ kg/m}^3; \quad Y_{XS} = 16,02; \quad m_S = 2,25 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ $k_{AB} = 1,40 \text{ kg/m}^3; \quad k_{AA} = 0,61 \text{ kg/m}^3; \quad Y_{AB,S} = 0,054; \quad Y_{AA,S} = 0,063$ $Y_{B,S} = 0,160; \quad Y_{A,S} = 0,071; \quad Y_{E,S} = 0,015$ $k_1 = 1,75 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}; \quad k_2 = 2,94 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}; \quad k_6 = 1,22 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ $k_9 = 1,5 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}; \quad k_{14} = 4,11 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}; \quad k_{15} = 3,56 * 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	

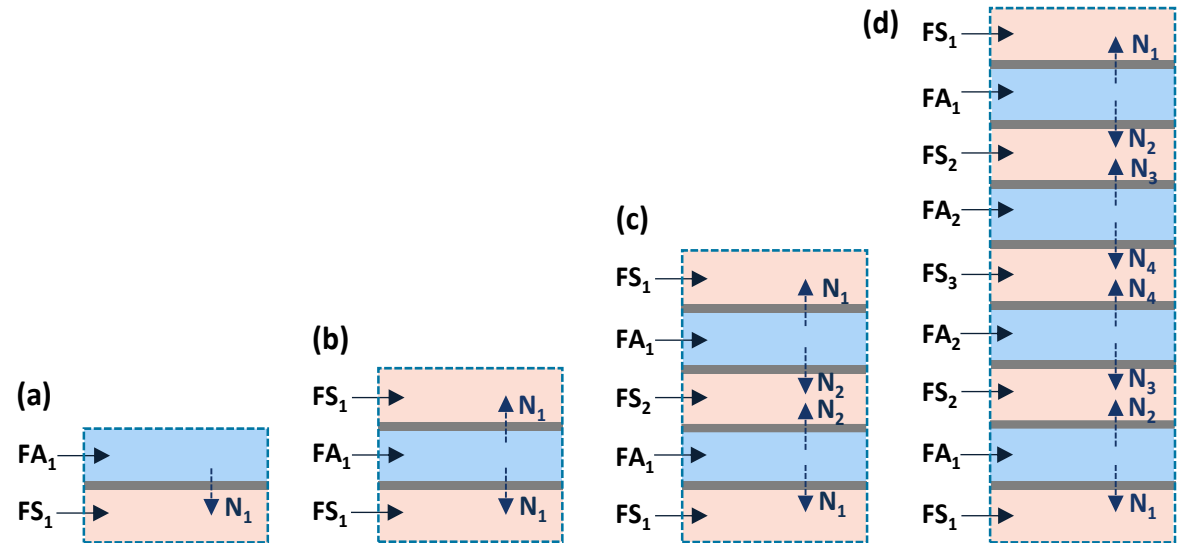
Por otra parte, para el modelo de la ELLM, en la Figura 4a se esquematiza la teoría de resistencias en serie utilizada para describir la transferencia de masa a través de los poros de la membrana, y en la Figura 4b, la división de la membrana para la ejecución del modelo por el método de diferencias finitas.

Figura 4. (a) Representación de la teoría de resistencias en serie entre fase acuosa (FA), membrana y fase solvente (FS) y (b) Vista superior de la membrana plana dividida en elementos diferenciales.



En la Figura 5 se esquematiza el proceso de extracción utilizando una, dos, cuatro y ocho membranas.

Figura 5. Vista lateral del módulo de ELLM con (a) una membrana, (b) dos membranas, (c) cuatro membranas y (d) ocho membranas.



En la Tabla 10 se muestran los balances de masa y las ecuaciones constitutivas para el modelo de ELLM. Las variables de entrada son, caudal de la fase acuosa (Q_{ac}) (igual al caudal de la fase solvente (Q_{st})), y concentraciones iniciales de los solutos (compuestos ABE) en la fase acuosa ($C_{ac}^A, C_{ac}^B, C_{ac}^E$) y en la fase solvente ($C_{st}^A, C_{st}^B, C_{st}^E$).

Se consideró que la densidad (ρ) y viscosidad (u) de la fase acuosa (FA) y solvente (FS) pueden aproximarse a la del agua y el solvente puros, respectivamente, en base a lo reportado por Ballesteros & Gutiérrez (2015), quienes evaluaron ρ y u con y sin la aproximación, y encontraron errores máximos en ρ de 0,64% y 1,28%, y en u de 0,47% y 3,28%, en la FA y FS, respectivamente.

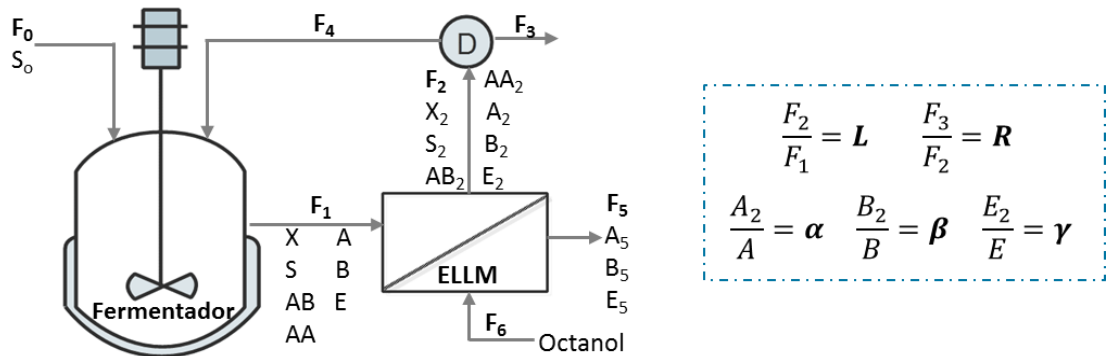
Tabla 10. Sistema de ecuaciones para el modelamiento de la extracción líquido - líquido con membranas utilizando un módulo membranario *plate and frame*.

Ecuaciones de balance	Lado fase acuosa [kg/s·m]		$\frac{\Delta M_{ac}}{\Delta x} = -N * h * \varepsilon \quad (1)$
	Lado fase solvente [kg/s·m]		$\frac{\Delta M_{st}}{\Delta x} = N * h * \varepsilon \quad (2)$
	Resistencia a la transferencia de masa ^[14] [s/m]		$RR = \frac{P}{k_{ac}} + \frac{1}{k_m} + \frac{1}{k_{st}} \quad (3)$
	Flux de permeado ^[14] [kg/m ² ·s]		$N = \frac{P * C_1 - C_5}{RR} \quad (4)$
Ecuaciones constitutivas I: Coeficientes de transferencia de masa	Capa límite fase acuosa ^[25] [m/s]		$k_{ac} = \frac{Sh_{ac} * Di_{sto,w}}{d_h} \quad (5)$
	Membrana ^[25] [m/s]		$k_m = \frac{\varepsilon}{\tau} * \frac{Di_{sto,st}}{\delta} \quad (6)$
	Capa límite fase solvente ^[25] [m/s]		$k_{st} = \frac{Sh_{st} * Di_{sto,st}}{d_h} \quad (7)$
Ecuaciones constitutivas II: Números adimensionales	Reynolds* ^[17]		$Re = \frac{\rho * v * d_h}{u} \quad (8)$
	Schmidt* ^[17]		$Sc = \frac{u}{\rho * D_{sto}} \quad (9)$
	Sherwood* de acuerdo al régimen de flujo ^[26]	Laminar	$Sh = 1,86 (Re * Sc * d_h / l)^{1/3} \quad (10)$
		Transitorio	$Sh = 0,116 (Re^{2/3} - 125) Sc^{1/3} \left[1 + \left(\frac{d_h}{l} \right)^{2/3} \right] \quad (11)$
		Turbulento	$Sh = 0,04 * Re^{0,75} * Sc^{0,33} \quad (12)$
	Velocidad de flujo* [m/s]		$v = \frac{Q}{h * \delta} \quad (13)$
	Diámetro hidráulico [m]		$d_h = \frac{2 * h * E}{h + E} \quad (14)$
Ecuaciones constitutivas III: Propiedades fisicoquímicas y coeficientes de partición	Densidad [kg/m ³]	Fase acuosa	$\rho_w = -5,08 * 10^{-8} T^3 - 4,02 * 10^{-3} T^2 + 2,15 T + 7,14 * 10^2 \quad (15)$
		Fase solvente	$\rho_{st} = -0,822 T + 1067,257 \quad (16)$
	Viscosidad [Pa·s]	Fase acuosa	$u_w = -4,7 * 10^{-9} T^3 + 4,57 * 10^{-6} T^2 - 1,49 * 10^{-3} T + 1,64 * 10^{-1} \quad (17)$
		Fase solvente	$u_{st} = -0,0002 T + 0,0634 \quad (18)$
	Coeficiente de difusión soluto - agua ^[27] [m ² /s]		$Di_{sto,w} = 2,98 * 10^{-11} \frac{T}{u_b^{1,026} * VM_{sto}^{0,547}} \quad (19)$
	Coeficiente de difusión soluto - octanol ^[28] [m ² /s]		$Di_{sto,w} = 7,4 * 10^{-12} \frac{T * MM_{st}^{0,5}}{u_b * VM_{sto}^{0,6}} \quad (20)$
	Coeficientes de partición con octanol	Acetona	$P = -0,8597 + 0,0535 * C_{ac} + 0,0033 T \quad (21)$
		Butanol	$P = -4,8848 + 0,1919 * C_{ac} + 0,0268 T \quad (22)$
		Etanol	$P = -0,4767 + 0,1310 * C_{ac} + 0,0022 T \quad (23)$

* Deben ser calculados para la fase acuosa (w) y fase solvente (st)

Para el proceso integrado se planteó un fermentador con recirculación, y purga después del sistema de separación (ELLM) con el fin de evitar la acumulación de los compuestos no extraídos, como se muestra en la Figura 6.

Figura 6. Proceso de fermentación ABE y ELLM integrados.



Con base en esto, se desarrollaron de nuevo los balances en continuo para el fermentador en modo recirculación, los cuales se muestran en la Tabla 11 (el desarrollo matemático de éstas se encuentra resumido en el Anexo A). Las ecuaciones de la ELLM no cambian, por lo tanto el modelo para la fermentación y ELLM integradas está compuesto por las ecuaciones de las Tablas 8 (ecuaciones 9 a 15), 9, 10 y 11.

Las variables de entrada del modelo son la velocidad de dilución (D), la concentración de sustrato alimentado (S_0) y la relación de purga en el divisor (R); y las variables intermedias son, la relación de flujo másico de fase acuosa (L) y las concentraciones (α , β , γ), a la entrada y salida de la ELLM, y el caudal de fase acuosa (Q_{ac}) y sus concentraciones de solutos ($C_{ac}^A, C_{ac}^B, C_{ac}^E$) a la entrada de la ELLM.

Tabla 11. Balances para el modelamiento de la fermentación ABE en modo recirculación.

Biomasa (X)	$\frac{dX}{dt} = -\frac{1-R}{1-RL}D \cdot X + r_X \quad (1)$
Sustrato (S)	$\frac{dS}{dt} = D \left(S_0 - \frac{1-R}{1-RL}S \right) + r_S \quad (2)$
Ácido butírico (AB)	$\frac{dAB}{dt} = -\frac{1-R}{1-RL}D \cdot AB + r_{AB} \quad (3)$
Ácido acético (AA)	$\frac{dAA}{dt} = -\frac{1-R}{1-RL}D \cdot AA + r_{AA} \quad (4)$
Butanol (B)	$\frac{dB}{dt} = -\frac{1-RL\beta}{1-RL}D \cdot B + r_B \quad (5)$
Acetona (A)	$\frac{dA}{dt} = -\frac{1-RL\alpha}{1-RL}D \cdot A + r_A \quad (6)$
Etanol (E)	$\frac{dE}{dt} = -\frac{1-RL\gamma}{1-RL}D \cdot E + r_E \quad (7)$

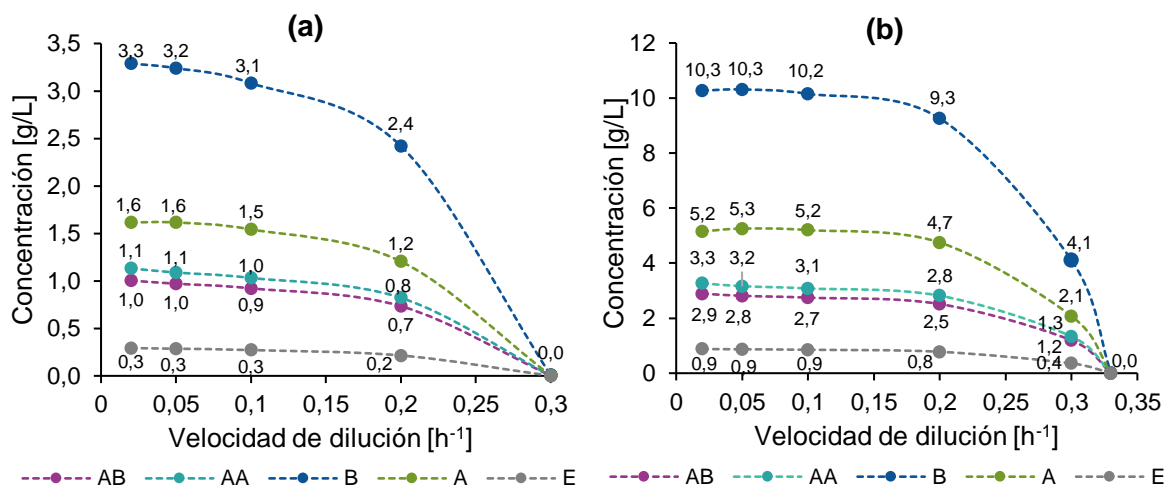
3.3. Análisis por simulación integrando la fermentación y la separación a través de Matlab®.

Para verificar el modelo de la fermentación ABE en continuo, se realizó un análisis de las concentraciones en estado estacionario de los productos de la fermentación: acetona, butanol, etanol, ácido acético y ácido butírico, a diferentes velocidades de dilución (el valor más alto es la $\mathcal{D}_{crítica}$), y a dos concentraciones de sustrato en la alimentación, 20 y 60 g/L; resultados obtenidos de la simulación del modelo en Matlab®, como se muestra en la Figura 7.

De las gráficas obtenidas se observa que al aumentar la \mathcal{D} , la concentración de los productos de la fermentación disminuye, y al aumentar S_0 , las concentraciones y la $\mathcal{D}_{crítica}$ aumentan, tal como se presenta en la literatura [29, 30, 31]. Por ejemplo, para S_0 de 60 g/L, y \mathcal{D} de 0,05, Bankar *et al.* (2012) obtuvieron concentraciones de butanol, acetona y etanol de 9,8, 5,2 y 0,95, respectivamente, valores con una diferencia de 4,9%, 1,9% y 5,5% respecto a los encontrados en el presente trabajo

bajo las mismas condiciones de operación, con lo cual se evidencia la coherencia del modelo planteado para la fermentación ABE con los datos reportados en la literatura. Es importante mencionar que, bajo las condiciones estudiadas, la suma de las concentraciones de butanol y ácido butírico se mantuvo por debajo del límite de inhibición en todas las pruebas.

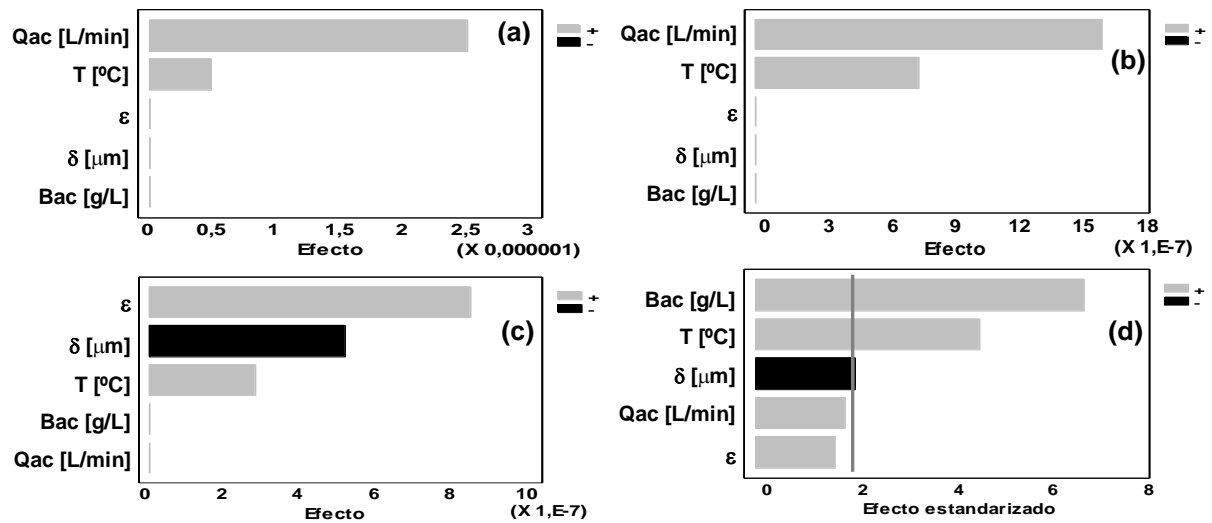
Figura 7. Concentración de acetona (A), butanol (B), etanol (E), ácido acético (AA) y ácido butírico (AB) en el fermentador, en función de la velocidad de dilución (D) para una concentración de sustrato en la alimentación (S_0) de (a) 20 g/L y (b) 60 g/L.



Para el caso de la ELLM, se realizó un análisis estadístico en el *software* Statgraphics Centurion XVI® de los resultados de la simulación en Matlab®, siguiendo la metodología planteada en la sección 3.3 (para los niveles de las variables de entrada ver Tabla 5, pág. 29).

La Figura 8 muestra los diagramas de Pareto obtenidos para el butanol utilizando una membrana en el módulo de ELLM. Para la acetona y el etanol se encontró que el efecto de las variables evaluadas fueron los mismos observados para butanol. También es importante mencionar que se verificó numéricamente que el efecto de las variables no cambiaba al considerarse más membranas.

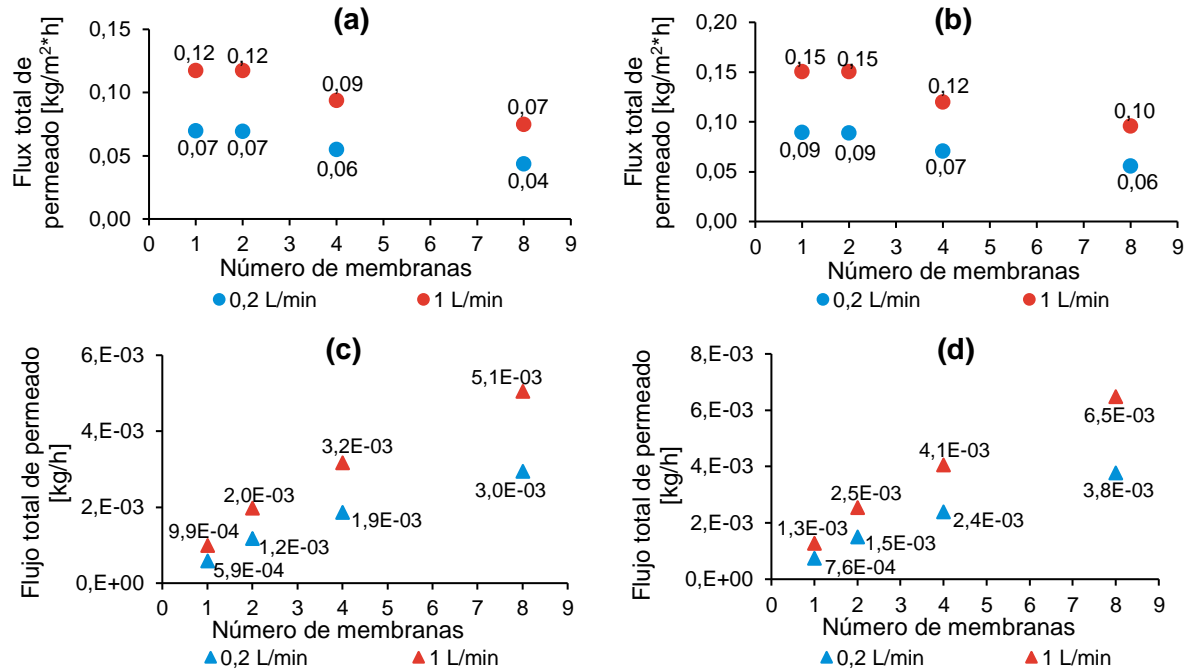
Figura 8. Diagramas de Pareto para el estudio de influencia de Q_{ac} , T , ε , δ y B_{ac} sobre (a) $k_{ac,B}$, (b) $k_{st,B}$, (c) $k_{m,B}$ y (d) N_B en la ELLM para una membrana.



Para todas estas variables se observó que los efectos obtenidos estuvieron de acuerdo con el fundamento teórico y las ecuaciones matemáticas establecidas en el modelo. Por ejemplo, el flux (N_B) se ve afectado positiva y significativamente por la concentración de butanol en la fase acuosa y la temperatura (B_{ac} y T), y de forma negativa y significativa por el espesor de la membrana (δ); debido a la influencia de estas variables en los coeficientes de transferencia de masa en la capa límite y en la membrana. A pesar de que el efecto de B_{ac} y T no fue significativo sobre $k_{ac,B}$, $k_{st,B}$ y $k_{m,B}$, sí lo fue para N_B , debido a que este depende también de los coeficientes P, los cuales están en función de estas dos variables. Los efectos encontrados en este análisis concuerdan también con los resultados hallados por Ballesteros & Gutiérrez (2015); Benavides & Guevara (2010), y Gómez (2011).

De igual forma, se evaluó el flux (N_B) y flujo (n_B) de permeado en el módulo de ELLM con una, dos, cuatro y ocho membranas, para dos valores de B_{ac} (8,2 y 10,4 g/L) y dos de Q_{ac} (0,2, y 1 L/min) (en todos los casos Q_{st} fue igual a Q_{ac}), como se muestra en la Figura 9. Se encontraron resultados con igual tendencia para acetona y etanol, con valores 4,2 y 12,0 veces menores que los de butanol, respectivamente, debido a los menores coeficientes de partición.

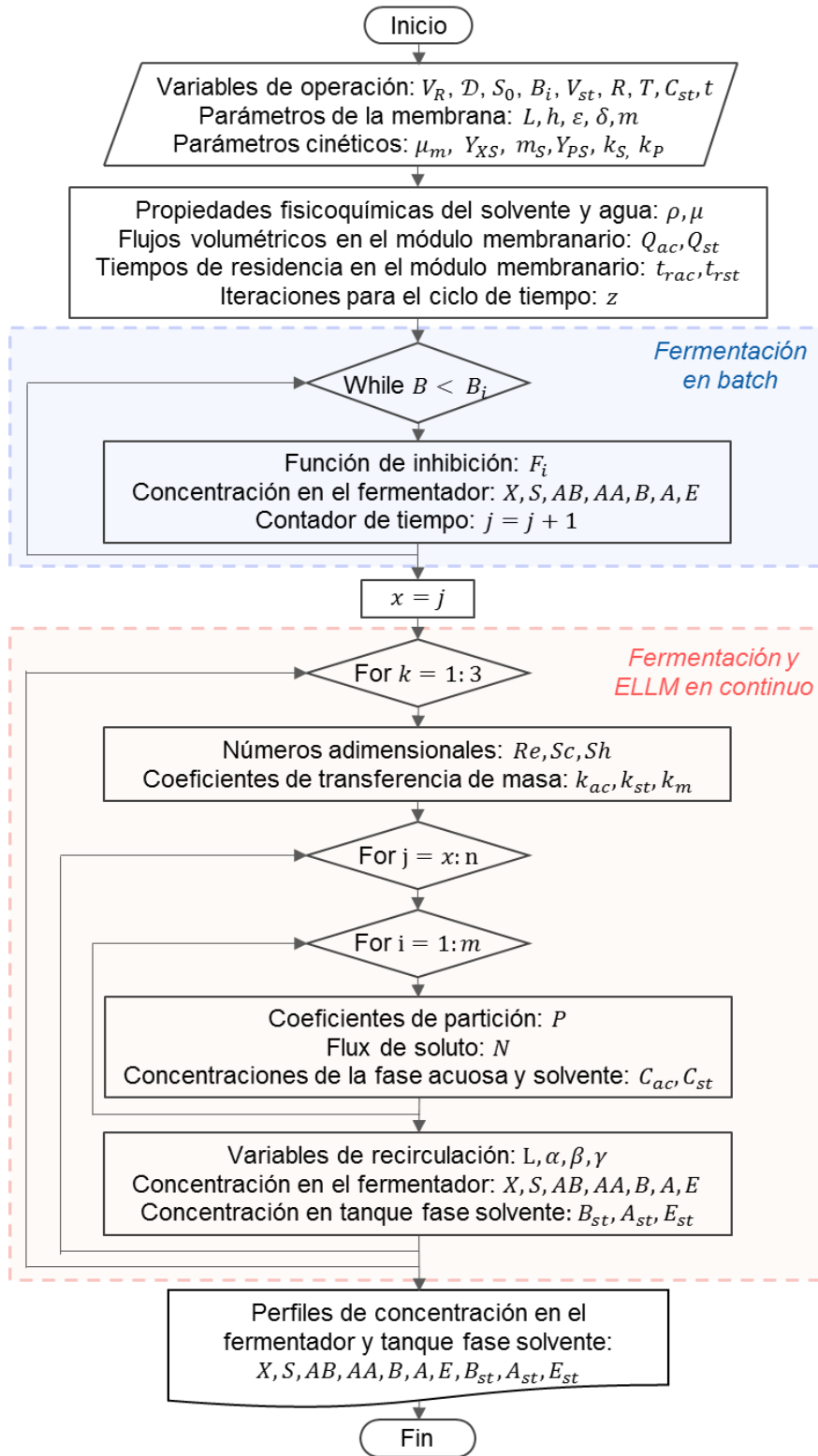
Figura 9. Flux y flujo total de permeado de butanol en el módulo de ELLM en continuo a 37 °C con 1, 2, 4 y 8 membranas, para Bac de 8,2 g/L (a,c) y 10,4 g/L (b,d), y Qac de 0,2 y 1 L/min.



Se observó que al aumentar tanto Q_{ac} como B_{ac} , hubo un mayor flux y flujo de permeado; mientras que al aumentar el número de membranas, aumentó el flujo pero disminuyó el flux, debido a que al haber mayor cantidad de compartimientos con fase solvente (como se mostró en la Figura 5), ésta se satura más rápido. Es importante resaltar que los flux de butanol encontrados para una B_{ac} de 10,4 g/L, fueron hasta 3,2 veces mayores que los reportados por Lopez *et al.* (2014) para una B_{ac} de 20 g/L. Así mismo, se encontró que para las configuraciones de 4 y 8 membranas (ver Figura 5), los flux de los compartimientos (N_1 y N_2 para 4 membranas, y N_1 , N_2 , N_3 y N_4 para 8 membranas) no variaron considerablemente uno del otro, dado que sus diferencias estuvieron entre 0,03% y 0,16%, debido al relativamente pequeño tamaño de las membranas considerado.

Por otra parte, la resolución numérica del modelo integrado se presenta en el diagrama de flujo de la Figura 10.

Figura 10. Diagrama de flujo para la resolución numérica del modelo matemático integrado de la fermentación y ELLM en estado transitorio.

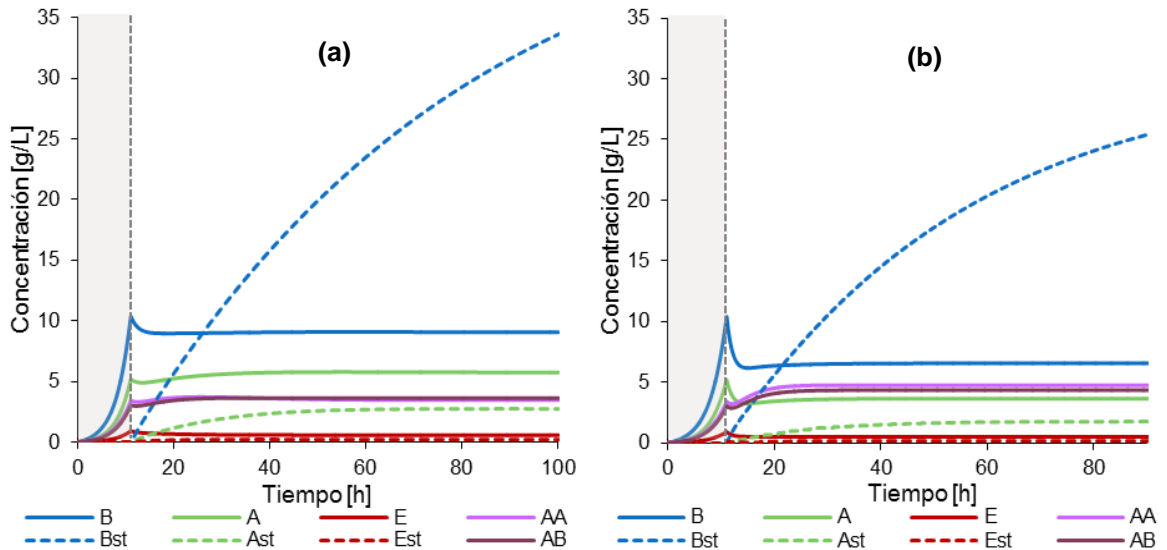


En azul se esquematiza el cálculo de los perfiles de concentración en el reactor para la fermentación *Batch* hasta alcanzar el límite B_i (concentración de butanol considerada como límite antes de comenzar la inhibición), y en rojo el cálculo de los perfiles de concentración tanto en el reactor como en el tanque de fase solvente en continuo, para cada soluto (k), tiempo (j) y partición en la membrana (i) (el código de Matlab® se muestra en el Anexo B). Este proceso integrado se simuló con un fermentador de 10 L, un módulo de ELLM con ocho membranas, pues con éste se obtuvo un alto flujo de permeado sin disminuir considerablemente el flux, y una relación de purga en el divisor (R) de 0,96.

La verificación de este modelo se realizó a través de un análisis de influencia de variables de proceso con el *software* Statgraphics Centurion XVI®, de los resultados obtenidos en Matlab®. De acuerdo al fundamento teórico y las ecuaciones planteadas en el modelo, esta verificación dio resultados favorables para continuar con el análisis del proceso integrado (el detallado de estas pruebas se presenta en el Anexo C). Con base en estos análisis se fijaron las condiciones de operación del proceso integrado, las cuales fueron: S_0 (70 g/L), D (0,1 y 0,3 h⁻¹) y B_i (10,4 g/L). Los perfiles de concentración en el fermentador y tanque de fase solvente obtenidos bajo estas condiciones se muestran en la Figura 11.

En la Figura 11 se observan las dos etapas del proceso, la primera de ellas consiste en la fermentación *Batch* sin acoplar a la extracción (zona en fondo gris), la cual operó durante 11 h hasta alcanzar el límite B_i . Una vez fue alcanzada dicha condición, el simulador conecta el sistema de extracción ELLM y recirculación de fase acuosa (con purga) a la fermentación (zona en fondo blanco), hasta alcanzar una concentración de butanol del 80% del nivel de saturación de la fase solvente, al recircular la misma por el módulo para favorecer la acumulación de los compuestos ABE. De la figura se observa que el proceso tomaría de 90 a 100 h de operación para alcanzar dicho nivel.

Figura 11. Perfiles de concentración de acetona (A), butanol (B) y etanol (E) en el fermentador y tanque de fase solvente, y ácido acético (AA) y ácido butírico (AB) en el fermentador, para una S_0 de 70 g/L y dos D (a) $0,1 \text{ h}^{-1}$ y (b) $0,3 \text{ h}^{-1}$. En gris la fermentación *Batch* sin integrar y en blanco la fermentación y ELLM integradas en continuo.



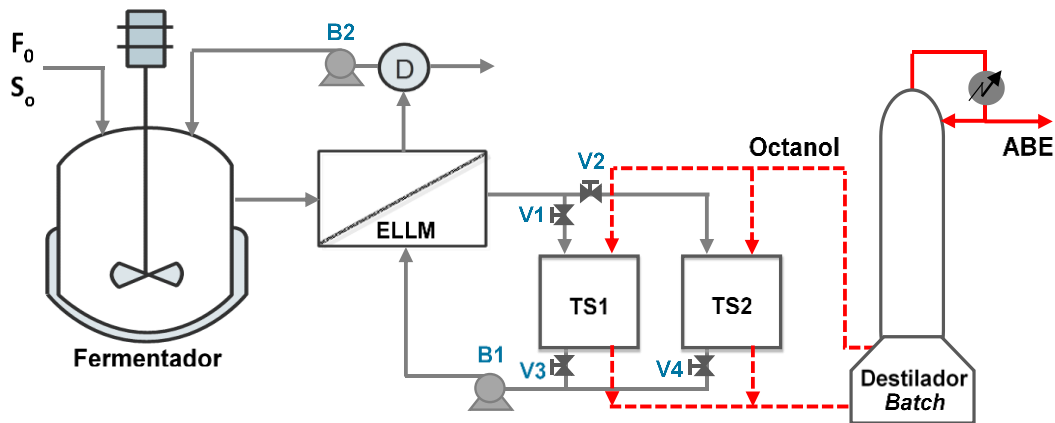
Se obtuvieron PR_B de 0,98 y 2,13 g/L-h para D de 0,1 y $0,3 \text{ h}^{-1}$, respectivamente; valores hasta 1,4 veces mayores a los obtenidos en la fermentación en continuo (sin recirculación de fase acuosa) bajo las mismas condiciones de operación, y hasta 4,3 veces mayores que las productividades obtenidas en la fermentación *Batch*. Es importante resaltar que para D de $0,1 \text{ h}^{-1}$ se alcanzaron concentraciones de los compuestos ABE en la fase solvente hasta 1,3 veces mayores que para D de $0,3 \text{ h}^{-1}$, y que los compuestos no extraídos en la ELLM (ácidos acético y butírico) no se acumularon durante el proceso, debido a la purga.

Es de anotar los elevados tiempos de ejecución de las rutinas en Matlab® (2 a 5 días por cada simulación en computadores de capacidad media), lo cual representa una oportunidad de mejora a futuro. Sin embargo, se consiguió la integración del proceso en estado transitorio, lo cual no había sido reportado en la literatura hasta el momento.

3.4. Evaluación por simulación de las etapas de tratamiento de los permeados obtenidos por ELLM, a través de Aspen Plus®.

La representación del proceso integrado de fermentación ABE y ELLM, junto con la recuperación del solvente empleado en la extracción, se muestra en la Figura 12.

Figura 12. Diagrama del proceso integrando fermentación ABE, ELLM y la etapa de recirculación del solvente empleado en la extracción.



Teniendo en cuenta la intención de realizar este proceso experimentalmente a escala de laboratorio, y para evitar que la ELLM se detenga al saturarse la fase solvente, se propuso un sistema con dos tanques de almacenamiento de solvente (TS1 y TS2), con una capacidad de 5 L cada uno. Cuando la fase solvente del TS1 alcanza el 80% de la concentración de saturación, éste se desconecta de la extracción (se cierra V1 y V3) y se conecta el TS2 (se abre V2 y V4), que contiene solvente ya destilado. A continuación, la fase solvente de TS1 es destilada para separar los compuestos ABE del octanol, y de esta manera recuperar el solvente para utilizarlo nuevamente en el proceso. Este procedimiento se alterna para los dos tanques, de tal manera que la destilación se haga en modo *Batch*, pero el proceso global sea continuo.

De acuerdo a los resultados obtenidos en la Fase 3, se simuló una destilación *Batch* en el *software* Aspen Plus® para recuperar el octanol, al evaluar el proceso con dos

velocidades de dilución en la alimentación al fermentador ($0,1$ y $0,3 \text{ h}^{-1}$). Para esto, se siguió la metodología propuesta por Barrera *et al.* (2012), en la cual los parámetros de operación de la destilación *Batch* como relación de reflujo (RR), relación destilado/alimentación (RDA), número de etapas (NE), temperaturas del condensador y del rehervidor (TC, TR) y el consumo energético de la columna (CE), son estimados al simular la destilación en continuo utilizando primero el método corto *Winn-Underwood-Gilliland* ($DSTWU$), y luego el método riguroso *RadFrac*. A partir de estos resultados, se simula la destilación *Batch* con el método riguroso *BatchSep* para obtener el tiempo de operación y las composiciones en los fondos y el destilado.

Las condiciones de la alimentación al destilador y los resultados obtenidos de la simulación en Aspen Plus® con los tres métodos preestablecidos por el simulador, se muestran en la Tabla 12. La carga inicial para la destilación *Batch* fue de 5 L (4,06 kg), que corresponde al volumen de la fase solvente (octanol más compuestos ABE) almacenada en el tanque, y los criterios de parada (0,999 p/p de octanol en fondos y 0,990 p/p de ABE en destilado) se alcanzaron a las 4,1 h de operación.

Tabla 12. Condiciones de la alimentación al destilador y resultados de la simulación utilizando los métodos *DSTWU* y *Radfrac*.

		$D = 0,1 \text{ h}^{-1}$	$D = 0,3 \text{ h}^{-1}$
Alimentación al destilador		$P = 1 \text{ atm}; T = 37^\circ\text{C}$ $W_O = 0,9550; W_B = 0,0415;$ $W_A = 0,0033; W_E = 0,0002$ <i>Flujo másico = 1 kg/h</i>	$P = 1 \text{ atm}; T = 37^\circ\text{C}$ $W_O = 0,9662; W_B = 0,0315;$ $W_A = 0,0021; W_E = 0,0002$ <i>Flujo másico = 1 kg/h</i>
<i>DSTWU</i>		$RR = 0,4476; RDA = 0,0770;$ $NE = 15$	$RR = 0,4482; RDA = 0,0585$ $NE = 15$
<i>Radfrac</i>		$TC = 82,0 \text{ }^\circ\text{C}; TR = 178,4 \text{ }^\circ\text{C}$ $CE = 349,6 \text{ kJ/h}$	$TC = 84,0 \text{ }^\circ\text{C}; TR = 178,4 \text{ }^\circ\text{C};$ $CE = 352,0 \text{ kJ/h}$
<i>BatchSep</i>	Destilado	$W_O = 0,0028; W_B = 0,9184;$ $W_A = 0,0743; W_E = 0,0045$	$W_O = 0,0058; W_B = 0,9256;$ $W_A = 0,0626; W_E = 0,0060$
	Fondos	$W_O = 0,9997; W_B = 0,0003;$ $W_A = 0; W_E = 0$	$W_O = 0,9997; W_B = 0,0003;$ $W_A = 0; W_E = 0$

En cuanto al requerimiento energético de la destilación *Batch*, fueron necesarios 8,32 MJ/kg de butanol para D de $0,1 \text{ h}^{-1}$, y 11,00 MJ/kg de butanol para D de $0,3 \text{ h}^{-1}$, debido a que para este último caso, la concentración de los compuestos ABE en la fase solvente era menor comparada con la de $0,1 \text{ h}^{-1}$, lo cual dificultó la separación. Este consumo energético es bajo comparado con otras técnicas para obtener los compuestos ABE, como arrastre con vapor (24,2 MJ/kg de butanol), destilación directa del caldo de fermentación (18,4 MJ/kg de butanol) y arrastre con gas (13,8 MJ/kg de butanol) [19], teniendo en cuenta que la destilación de la fase solvente representa el mayor consumo de energía en el sistema de separación del proceso (ELLM + destilación *Batch*). Estos resultados indican que es posible recuperar el solvente para recircularlo al proceso y de esta manera, disminuir los costos.

4. CONCLUSIONES

- Se evaluaron los coeficientes de partición (P) de dodecanol, octanol y aceite de palma para extraer butanol, acetona y etanol. Los mayores coeficientes P se obtuvieron con octanol para los tres compuestos ABE, con valores hasta 35,9 veces mayores que los de solventes empleados en trabajos anteriormente realizados en el CICTA-UIS; además, se logró separar etanol con el mismo solvente, lo cual permite la extracción simultánea de los tres compuestos. Con estos datos, se plantearon polinomios para los coeficientes P en función de la temperatura y la concentración de butanol en la fase acuosa, necesarios para el modelamiento de la ELLM.
- Se propusieron los modelos matemáticos en estado transitorio de la fermentación ABE en un reactor CSTR, y la ELLM en un módulo *plate and frame*, de forma individual e integrada. El modelo de la fermentación en modo *Batch* y en continuo, representó las relaciones entre consumo de sustrato, crecimiento celular, producción de metabolitos primarios (ácidos acético y butírico) y secundarios (acetona, butanol y etanol). Para la ELLM se desarrolló un modelo para una, dos, cuatro y ocho membranas, bajo la principal consideración de no colmatación en la membrana a causa de la biomasa. Posteriormente, se desarrolló un modelo matemático del proceso integrado, después de un arranque de la fermentación en *Batch*, lo cual no había sido reportado en la literatura hasta la fecha, y que está conformado por un sistema de 14 ecuaciones diferenciales, 31 ecuaciones algebraicas, 45 variables y 26 parámetros.
- Se desarrolló una programación numérica en el *software* Matlab® para simular el proceso y verificar los modelos de fermentación y ELLM con y sin integración. Los resultados de las simulaciones fueron coherentes con lo reportado en la literatura y con las expresiones matemáticas establecidas. El proceso integrado permitió trabajar con concentraciones de sustrato en la alimentación y velocidades de dilución más altas, y se obtuvieron productividades volumétricas de butanol hasta

1,4 veces mayores, respecto a la fermentación en continuo sin integración y hasta 4,3 veces mayores respecto a la fermentación *Batch*.

- Se propuso una destilación *Batch* para la recuperación del solvente después de la ELLM. De la simulación en Aspen Plus® se obtuvo una pureza de octanol en fondos de 0,999 p/p, y de compuestos ABE en el destilado de 0,997 p/p, después de 4,1 h de operación, tiempo considerablemente inferior si se tienen en cuenta las 80 a 90 h de uso del solvente durante la ELLM. Por otra parte, el consumo energético requerido estuvo entre 8,3 y 11,0 MJ/kg de butanol, que representa un bajo consumo comparado con lo reportado en la literatura existente para la recuperación de los productos de la fermentación ABE. Estos resultados fortalecen la hipótesis sobre la posibilidad de reutilización del solvente durante el proceso, disminuyendo los costos del producción.
- En el presente trabajo se planteó un novedoso proceso integrado de fermentación ABE, extracción líquido-líquido con membranas con octanol como solvente y recuperación del mismo mediante destilación, a través de modelamiento matemático y simulación en estado transitorio, que se puede operar de forma continua, asegurando la reducción de los costos de producción de butanol, además de obtener acetona y etanol como subproductos valiosos.

5. RECOMENDACIONES

- Optimizar los tiempos de la simulación en Matlab®, mediante mejoras en el código o el uso de computadoras con mayor capacidad de procesamiento.
- Estudiar experimentalmente la cinética de la fermentación acetobutílica en función del pH y la temperatura, como opción de mejora para el modelo matemático.
- Realizar pruebas experimentales de la extracción líquido-líquido con membranas empleando el módulo *plate and frame* y las membranas desarrolladas en el CICTA-UIS, para verificar el modelo matemático con datos experimentales.
- Desarrollar el montaje a escala laboratorio de la fermentación, la extracción líquido-líquido con membranas y la destilación de la fase solvente de forma integrada, según las especificaciones consideradas en el presente trabajo, para verificar el modelo integrado con datos experimentales y poder hacer mejoras al mismo.

CITAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MAYANK, Rahul; RANJAN, Amrita y MOHOLKAR, Vijayanand. Mathematical models of ABE fermentation: review and analysis. *Critical Reviews in Biotechnology*, 2013, vol.33 no.4., p. 419-447.
- [2] KIM, Boeun, et al. Optimization of the cyclic operation of a continuous biobutanol fermentation process integrated with ex-situ adsorption recovery. *Sciencedirect*, 2015, vol.48 no.8., p. 1204 - 1209.
- [3] YAN, S, et al. Bioenergy and biofuel from biowastes and biomass. *American Society of Civil Engineers*, 2010.
- [4] KUJAWSKA, Anna, et al. ABE fermentation products recovery methods - A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2015, no.48., p. 648 - 661.
- [5] DURÁN PADILLA, Victoria Rosalía. Producción de biobutanol a partir de suero de quesería usando una cepa mutante de *Clostridium acetobutylicum*. Aguascalientes, 2015. Universidad Autónoma de Aguascalientes. Departamento de Ingeniería Bioquímica.
- [6] LIAO, Chen, et al. Integrated, systems metabolic picture of acetone-butanol-ethanol fermentation by *Clostridium acetobutylicum*. *PNAS*, 2014, vol.112 no.27., p. 8505-8510.
- [7] NAPOLI, Fabio, et al. Continuous lactose fermentation by *Clostridium acetobutylicum* - Assessment of energetics and product yields of the acidogenesis. *Enzyme and Microbial Technology*, 2012, no.50., p. 165-172.
- [8] AMAYA, Yoelis Adriana & ARIAS, Eyelyn Zareth. Planteamiento de un modelo estequiométrico basado en restricciones bioquímicas de la ruta metabólica para la producción de n-butanol a partir de glucosa utilizando *Clostridium acetobutylicum* ATCC 824. Bucaramanga, 2012. Trabajo de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.

- [9] MULCHANDANI, Ashok K. Biosynthesis of industrial solvents in a cell-retention fermentor. Montreal, 1985. Universidad McGill. Departamento de Ingeniería Química.
- [10] DURÁN PADILLA, Victoria Rosalía, et al. Iron effect on the fermentative metabolism of *Clostridium acetobutylicum* ATCC 824 using cheese whey as substrate. *Biofuel Research Journal*, 2014, no.4., p. 129-133.
- [11] LÓPEZ MENDOZA, Liliana Carolina, et al. Study of acetone, butanol, and ethanol liquid extraction from prepared aqueous solutions using membrane contactor technique. *Ciencia, Tecnología y Futuro*, 2014, vol.5 no.4., p. 97-112.
- [12] COTAMO DE LA ESPRIELLA, Ricardo Javier; BARÓN NUÑEZ, Fredy Wsbaldo y MUVDI NOVA, Carlos Jesús. Operating conditions influence on VMD and SGMD for ethanol recovery from aqueous solutions. *Ciencia, Tecnología y Futuro*, 2015, vol.6 no.2., p. 69-80.
- [13] BALLESTEROS, Dixon Andrés & GUTIÉRREZ, Jorge Luis. Estudio de la recuperación de butanol de mezclas acuosas ABE, por medio de extracción líquido-líquido con membrana, utilizando modelamiento matemático. Bucaramanga, 2015. Trabajo de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.
- [14] GIORNO, L., DRIOLI, E. y STRATHMANN, H. 2016. Principle of membranes contactors. *Encyclopdia of membranes*, 2016, p. 1659-1664.
- [15] PALLEROS, Daniel R. Liquid-Liquid Extraction. *Journal of Chemical Education*, 1995, vol.72 no.4., p. 319-321.
- [16] ISHIZAKI, Ayaaki, et al. Extrative Acetone-Butanol-Ethanol Fermentation Using Methylated Crude Palm Oil as Extractant in Batch Culture of *Clostridium saccharoperbutylacetonicum* N1-4 (ATCC 13564). *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 1999, vol.87 no.3., p. 352-356.

- [17] GREEN, Don W. & PERRY, Robert H. Perry's Chemical Engineers' Handbook. McGraw-Hill, 2008. p. 1-21, 15-29, 15-30. ISBN: 0-07-142294-3.
- [18] GROOT, W. J., et al. Butanol recovery from fermentations by liquid-liquid extraction and membrane solvent extraction. *Bioprocess Engineering*, 1990, no.5., p. 203-216.
- [19] KURKIJÄRVI, Antti; LEHTONEN, Juha & LINNEKOSKI, Juha. Novel dual extraction process for acetone-butanol-ethanol fermentation. *Separation and Purification Technology*, 2014, vol.124, p. 18-25.
- [20] TANAKA, Shigemitsu, et al. Membrane-assisted extractive butanol fermentation by *Clostridium saccharoperbutylacetonicum* N1-4 with 1-dodecanol as the extractant. *Bioresource Technology*, 2012, vol.116, p. 448-452.
- [21] RINCÓN M., Sandra Milena & MARTÍNEZ C., Daniel Mauricio. Análisis de las propiedades del aceite de palma en el desarrollo de su industria. *Palmas*, 2009, vol.30 no.2., p. 11-24.
- [22] DOUGLAS, James M. Conceptual design of chemical processes. McGraw-Hill, 1988. p. 174. ISBN: 0-07-100195-6.
- [23] SHUKLA, R.; KANG, W. y SIRKAR, K. Acetone - butanol - ethanol (ABE) production in a novel hollow fiber fermentor - extractor. *Biotechnology and Bioengineering*, 1989, vol.34, p. 1158-1166.
- [24] BROWN, Theodore L., et al. *Química: La ciencia central*. México: Pearson Educación, 2004. p. 108. ISBN: 970-26-0468-0.
- [25] BOCQUET, S., et al. Modeling the Mass Transfer in Solvent-Extraction Processes with Hollow-Fiber Membranes. *AIChE Journal*, 2005, vol.51 no.4., p. 1067-1079.

- [26] CHIAM, Chel-Ken & SARBATLY, Rosalam. Vacuum membrane distillation processes for aqueous solution treatment - A review. *Chemical Engineering and Processing*, 2013, no.74., p. 27-54.
- [27] SIDDIQI, M. & LUCAS, K. Correlation for Prediction of Diffusion in Liquids. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1986, vol.6, p. 839-843.
- [28] WILKE, C. & CHANG, P. Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *AIChE Journal*, 1995, p. 264-270.
- [29] AFSCCHAR, A. S., et al. Production of acetone and butanol by *Clostridium acetobutylicum* in continuous culture with cell recycle. *Applied Microbiology Biotechnology*, 1985, no.22., p. 394-398.
- [30] FERRAS, E.; MINIER, M. y GOMA, G. Acetonobutylic Fermentation: Improvement of Performances by Clouping Continuous Fermentation and Ultrafiltration. *Biotechnology and Bioengineering*, 1985, vol.28, p. 523-533.
- [31] BANKAR, Sandip B., et al. Continuous two stage acetone-butanol-ethanol fermentation with integrated solvent removal using *Clostridium acetobutylicum* B 5313. *Bioresource Technology*, 2012, vol.106., p. 110-116.

BIBLIOGRAFÍA

AFSCHAR, A. S., et al. Production of acetone and butanol by *Clostridium acetobutylicum* in continuous culture with cell recycle. *Applied Microbiology Biotechnology*, 1985, no.22., p. 394-398.

AMAYA, Yoelis Adriana & ARIAS, Eyleyn Zareth. Planteamiento de un modelo estequiométrico basado en restricciones bioquímicas de la ruta metabólica para la producción de n-butanol a partir de glucosa utilizando *Clostridium acetobutylicum* ATCC 824. Bucaramanga, 2012. Trabajo de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.

BALLESTEROS, Dixon Andrés & GUTIÉRREZ, Jorge Luis. Estudio de la recuperación de butanol de mezclas acuosas ABE, por medio de extracción líquido-líquido con membrana, utilizando modelamiento matemático. Bucaramanga, 2015. Trabajo de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.

BANKAR, Sandip B., et al. Continuous two stage acetone-butanol-ethanol fermentation with integrated solvent removal using *Clostridium acetobutylicum* B 5313. *Bioresource Technology*, 2012, vol.106., p. 110-116.

BARRERA, Rolando; VILLA, Aida Luz y MONTES DE CORREA, Consuelo. Modeling and simulation of a batch distillation column for recovering limonene epoxide. *EIA*, 2012, no.18., p. 131-141.

BENAVIDES PRADA, Omar Andrés, et al. Vacuum Membrane Distillation: Modeling and analysis for recovery of the ethanol from ethanol/water solutions. *Ciencia, Tecnología y Futuro*, 2013, vol. 5 no.2., p. 47-60.

BOCQUET, S., et al. Modeling the Mass Transfer in Solvent-Extraction Processes with Hollow-Fiber Membranes. *AIChE Journal*, 2005, vol.51 no.4., p. 1067-1079.

BROWN, Theodore L., et al. Química: La ciencia central. México: Pearson Educación, 2004. p. 108. ISBN: 970-26-0468-0.

CHIAM, Chel-Ken & SARBATLY, Rosalam. Vacuum membrane distillation processes for aqueous solution treatment - A review. Chemical Engineering and Processing, 2013, no.74., p. 27-54.

COTAMO DE LA ESPRIELLA, Ricardo Javier; BARÓN NUÑEZ, Fredy Wsbaldo y MUVDI NOVA, Carlos Jesús. Operating conditions influence on VMD and SGMD for ethanol recovery from aqueous solutions. Ciencia, Tecnología y Futuro, 2015, vol.6 no.2., p. 69-80.

DOUGLAS, James M. Conceptual design of chemical processes. McGraw-Hill, 1988. p. 174. ISBN: 0-07-100195-6.

DURÁN PADILLA, Victoria Rosalía. Producción de biobutanol a partir de suero de quesería usando una cepa mutante de Clostridium acetobutylicum. Aguascalientes, 2015. Universidad Autónoma de Aguascalientes. Departamento de Ingeniería Bioquímica.

DURÁN PADILLA, Victoria Rosalía, et al. Iron effect on the fermentative metabolism of Clostridium acetobutylicum ATCC 824 using cheese whey as substrate. Biofuel Research Journal, 2014, no.4., p. 129-133.

FERRAS, E.; MINIER, M. y GOMA, G. Acetobutylic Fermentation: Improvement of Performances by Clouping Continuous Fermentation and Ultrafiltration. Biotechnology and Bioengineering, 1985, vol.28, p. 523-533.

GIORNO, L., DRIOLI, E. y STRATHMANN, H. 2016. Principle of membranes contactors. Encyclopdia of membranes, 2016, p. 1659-1664.

GÓMEZ OSORIO, Martín Alonso. Planteamiento de un modelo matemático para el análisis del proceso de pervaporación utilizado en la concentración de alcohol carburante. Bucaramanga, 2011. Trabajo de grado (Ingeniería Química). Universidad Industrial de Santander. Escuela de Ingeniería Química.

GREEN, Don W. & PERRY, Robert H. Perry's Chemical Engineers' Handbook. McGraw-Hill, 2008. p. 1-21, 15-29, 15-30. ISBN: 0-07-142294-3.

GROOT, W. J., et al. Butanol recovery from fermentations by liquid-liquid extraction and membrane solvent extraction. Bioprocess Engineering, 1990, no.5., p. 203-216.

ISHIZAKI, Ayaaki, et al. Extrative Acetone-Butanol-Ethanol Fermentation Using Methylated Crude Palm Oil as Extractant in Batch Culture of *Clostridium saccharoperbutylacetonicum* N1-4 (ATCC 13564). Journal of Bioscience and Bioengineering, 1999, vol.87 no.3., p. 352-356.

KIM, Boeun, et al. Optimization of the cyclic operation of a continuous biobutanol fermentation process integrated with ex-situ adsorption recovery. Sciencedirect, 2015, vol.48 no.8., p. 1204 - 1209.

KUJAWSKA, Anna, et al. ABE fermentation products recovery methods - A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2015, no.48., p. 648 - 661.

KURKIJÄRVI, Antti; LEHTONEN, Juha & LINNEKOSKI, Juha. Novel dual extraction process for acetone-butanol-ethanol fermentation. Separation and Purification Technology, 2014, vol.124, p. 18-25.

LIAO, Chen, et al. Integrated, systems metabolic picture of acetone-butanol-ethanol fermentation by *Clostridium acetobutylicum*. PNAS, 2014, vol.112 no.27., p. 8505-8510.

LÓPEZ MENDOZA, Liliana Carolina, et al. Study of acetone, butanol, and ethanol liquid extraction from prepared aqueous solutions using membrane contactor technique. Ciencia, Tecnología y Futuro, 2014, vol.5 no.4., p. 97-112.

MAYANK, Rahul; RANJAN, Amrita y MOHOLKAR, Vijayanand. Mathematical models of ABE fermentation: review and analysis. Critical Reviews in Biotechnology, 2013, vol.33 no.4., p. 419-447.

MULCHANDANI, Ashok K. Biosynthesis of industrial solvents in a cell-retention fermentor. Montreal, 1985. Universidad McGill. Departamento de Ingeniería Química.

NAPOLI, Fabio, et al. Continuous lactose fermentation by *Clostridium acetobutylicum* - Assessment of energetics and product yields of the acidogenesis. *Enzyme and Microbial Technology*, 2012, no.50., p. 165-172.

PALLEROS, Daniel R. Liquid-Liquid Extraction. *Journal of Chemical Education*, 1995, vol.72 no.4., p. 319-321.

RINCÓN M., Sandra Milena & MARTÍNEZ C., Daniel Mauricio. Análisis de las propiedades del aceite de palma en el desarrollo de su industria. Palmas, 2009, vol.30 no.2., p. 11-24.

SHUKLA, R.; KANG, W. y SIRKAR, K. Acetone - butanol - ethanol (ABE) production in a novel hollow fiber fermentor - extractor. *Biotechnology and Bioengineering*, 1989, vol.34, p. 1158-1166.

SIDDIQI, M. & LUCAS, K. Correlation for Prediction of Diffusion in Liquids. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1986, vol.6, p. 839-843.

TANAKA, Shigemitsu, et al. Membrane-assisted extractive butanol fermentation by *Clostridium saccharoperbutylacetonicum* N1-4 with 1-dodecanol as the extractant. *Bioresource Technology*, 2012, vol.116, p. 448-452.

WILKE, C. & CHANG, P. Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *AIChE Journal*, 1995, p. 264-270.

YAN, S, et al. Bioenergy and biofuel from biowastes and biomass. *American Society of Civil Engineers*, 2010.

ANEXOS

Anexo A. Desarrollo de los balances de la fermentación con recirculación en continuo.

Relaciones (En el módulo de ELLM sólo se separa acetona, butanol y etanol)	Balance global en el reactor
$F_2 = LF_1 \quad (1)$ $F_3 = RF_2 \quad (2)$ $A_2 = \alpha A \quad (3)$ $B_2 = \beta B \quad (4)$ $E_2 = \gamma E \quad (5)$	$F_2 X_2 = F_1 X \quad \text{Reempazando (1):}$ $X_2 = \frac{1}{L} X \quad (6)$ <p style="text-align: center;"><i>Por analogía:</i></p> $AA_2 = \frac{1}{L} AA \quad (8)$ $AB_2 = \frac{1}{L} AB \quad (9)$
	$F_0 + F_3 = F_1$ <p style="text-align: center;"><i>Reemplazando (1) y (2):</i></p> $F_0 + RLF_1 = F_1$ $F_1 = \frac{F_0}{1 - RL} \quad (10)$

Balance por componentes	
Biomasa (Aplica el mismo balance para S, AA y AB)	Butanol (Aplica el mismo balance para A y E)
$F_0 X_0 + F_3 X_2 - F_1 X + r_x V = \frac{d(XV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>Reemplazando (1), (2) y (6):</i></p> $F_0 X_0 + RLF_1 * \frac{1}{L} X - F_1 X + r_x V = \frac{d(XV)}{dt}$ $F_0 X_0 + RF_1 X - F_1 X + r_x V = \frac{d(XV)}{dt}$ $F_0 X_0 - (1 - R)F_1 X + r_x V = \frac{d(XV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>Reemplazando (10):</i></p> $F_0 X_0 - \frac{1 - R}{1 - RL} F_0 X + r_x V = \frac{d(XV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>(÷ V):</i></p> $\left[X_0 - \frac{1 - R}{1 - RL} X \right] D + r_x = \frac{dX}{dt}$	$F_0 B_0 + F_3 B_2 - F_1 B + r_B V = \frac{d(BV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>Reemplazando (1), (2) y (4); B₀ = 0</i></p> $RLF_1 * \beta B - F_1 B + r_B V = \frac{d(BV)}{dt}$ $-(1 - RL\beta)F_1 B + r_B V = \frac{d(BV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>Reemplazando (10):</i></p> $-\frac{1 - RL\beta}{1 - RL} F_0 B + r_B V = \frac{d(BV)}{dt}$ <p style="text-align: center;"><i>(÷ V):</i></p> $-\frac{1 - RL\beta}{1 - RL} DB + r_B = \frac{dB}{dt}$

Anexo B. Código en Matlab® de la simulación integrada

```

%% Variables de entrada
disp('Ingrese los siguientes valores')
%Variables fermentador
Vr=0.01; %Volumen del reactor en m^3
d0=input('Velocidad de dilución en el reactor en 1/hora: ');
d0=d0/3600; %Velocidad de dilución alimentación [1/s]
se=input('Concentración de sustrato en la alimentación al reactor en Kg/m^3: ');
Bi=input('Concentración de butanol que debe alcanzar la fermentación batch en Kg/m^3: ');
%Parámetros cinéticos para la fermentación
um=9.72e-5; k1=1.75e-5; k2=2.94e-5; k3=16.02;
k4=2.25e-5; k5=0.054; k6=1.22e-5; k7=0.160;
k8=0.063; k9=1.5e-5; k10=0.071; k11=0.015;
k14=4.11e-5; k15=3.56e-5; ks=3.81; kba=1.40; kaa=0.607;
%Relaciones de recirculación
R=0.96; %Relación flujo FA salida módulo/flujo FA recirculación después de purga
S=0.96; %Relación flujo FA salida reactor/flujo FA salida módulo (supuesto
constante acá para calcular d1)
%Tiempo del proceso
t(1)=0;
tf=input('Duración del proceso en horas: ');
tf=tf*3600; %Tiempo del proceso en segundos
%Variables membrana/módulo membranario
tao=1; %Tortuosidad de la membrana
po=0.85; %Porosidad de la membrana
l=0.105; %Longitud de la membrana [m]
H=0.095; %Ancho de la membrana [m]
d=0.000050; %Espesor de la membrana [m]
E=0.0043; %Espesor del compartimiento (módulo) [m]
m=450; %Número de particiones a lo ancho de la membrana (para contador de
espacio,i);
T=37+273.15;%Temperatura en K
%Propiedades del solvente (octanol)
rost=-0.8217*T+1067.257; %Densidad del solvente [Kg/m^3] (Aspen Plus)
ust=-0.0002*T+0.0634; %Viscosidad del solvente [Pa.s] (Aspen Plus)
Mst=130.23; %Masa molar del solvente [kg/kmol]
%Propiedades del agua
row=(-5.08e-8)*T^3-(4.02e-3)*T^2+2.15*T+7.14e2; %Densidad del agua [Kg/m^3] (Aspen
Plus)
uw=(-4.7e-9)*T^3+(4.57e-6)*T^2-(1.49e-3)*T+(1.64e-1);%Viscosidad agua [Pa.s] (Aspen
Plus)
Mw=18.015; %Masa molar del agua [kg/kmol]
%Propiedades de los solutos (butanol, acetona y etanol)
VM(1)=0.1036; %Volumen molar en punto de ebullición butanol [m^3/Kmol] (Wilke&
Chang,1955)
VM(2)=0.0740; %Volumen molar en punto de ebullición acetona [m^3/Kmol] (Wilke&
Chang,1955)
VM(3)=0.0592; %Volumen molar en punto de ebullición etanol [m^3/Kmol] (Wilke &
Chang,1955)
%Tanque de fase solvente
Vtst=0.005; %Volumen del tanque de FS en m^3

%% Cálculos iniciales
%Flujos volumétricos en el módulo membranario
d1=d0/(1-R*S); %Velocidad de dilución salida del reactor [1/s]
Qact=Vr*d1; %Caudal total de la fase acuosa a la entrada del módulo membranario
[m^3/s]
Qac=Qact/4; %Caudal de fase acuosa en cada compartimiento [m^3/s]
Qstt=Qact*5/4; %Caudal total de fase solvente a la entrada del módulo membranario
[m^3/s]
Qst=Qstt/5; %Caudal de fase solvente en cada compartimiento [m^3/s]
%Particiones en la membrana
deltax=L/m; %Ancho de cada partición espacial de la membrana

```

```

Apar=deltax*H;      %Área de una partición [m^2]
Aparef=po*Apar;    %Área efectiva de transferencia de masa en una partición [m^2]
Am=H*E;            %Área transversal del compartimiento [m^2]
dh=(2*E*H)/(E+H); %Diámetro hidráulico del módulo [m]
%Tiempos de residencia (Son iguales en ambas fases) en el módulo membranario
trac=L*Am/Qac;     %De la fase acuosa [s]
trst=L*Am/Qst;     %De la fase solvente [s]
%Tamaño de paso y contador de tiempo
h=trac            %Tamaño de paso para método de Runge-Kutta [s]
z=(tf-t(1))/h;    %Número de intervalos (para contador de tiempo, j)
z=round(z)
%Velocidades en el módulo membranario
Vac=Qac/Am;       %Velocidad de la fase acuosa [m/s]
Vst=Qst/Am;       %Velocidad de la fase solvente [m/s]
%% MODELAMIENTO DE LA FERMENTACIÓN EN BATCH (Opera hasta cuando se alcanza Bi)

%% Condiciones iniciales
C1(1)=0.1; C2(1)=80; C3(1)=0; C4(1)=0; C5(1)=0; C6(1)=0; C7(1)=0;
fi=1; j=1;
b=0.95; a=0.95; e=0.95;
%Balances de masa (Sistema de EDO's)
f1=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) um*(C2/(C2+ks))*fi*C1;
f2=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -
(k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k4+k1*(C2/(C2+ks))*(C3/(C3+kba))+k2*(C2/(C2+ks))*(C4/(C4+kaa)))*C1;
f3=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) (k5*k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k5*k4-
k6*(C2/(C2+ks))*(C3/(C3+kba)))*C1;
f4=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) (k8*k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k8*k4-
k9*(C2/(C2+ks))*(C4/(C4+kaa)))*C1;
f5=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7)
(k7*k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k7*k4+k14*(C2/(C2+ks))*(C3/(C3+kba)))*C1;
f6=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7)
(k10*k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k10*k4+k15*(C2/(C2+ks))*(C4/(C4+kaa)))*C1;
f7=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) k11*(k3*um*(C2/(C2+ks))*fi+k4)*C1;

%MÉTODO DE RUNGE KUTTA 4 ORDEN
while C5(j)<Bi;

%Función de inhibición
if C5(j)+C3(j)<8 fi=exp(-0.01*(C5(j)+C3(j)));
else fi=-0.153*(C5(j)+C3(j))+2.16;
end

%Constantes 1
l1=h*f1(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
m1=h*f2(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
n1=h*f3(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
o1=h*f4(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
p1=h*f5(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
q1=h*f6(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
r1=h*f7(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
%Constantes 2
l2=h*f1(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
m2=h*f2(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
n2=h*f3(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
o2=h*f4(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
p2=h*f5(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
q2=h*f6(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
r2=h*f7(C1(j)+11/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
%Constantes 3
l3=h*f1(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
m3=h*f2(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
n3=h*f3(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
o3=h*f4(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
p3=h*f5(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
q3=h*f6(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
r3=h*f7(C1(j)+12/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
%Constantes 4
l4=h*f1(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);

```

```

m4=h*f2(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
n4=h*f3(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
o4=h*f4(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
p4=h*f5(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
q4=h*f6(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
r4=h*f7(C1(j)+13,C2(j)+m3,C3(j)+n3,C4(j)+o3,C5(j)+p3,C6(j)+q3,C7(j)+r3);
%Concentraciones y tiempo en i+1
C1(j+1)=C1(j)+(11+2*12+2*13+14)/6;      C2(j+1)=C2(j)+(m1+2*m2+2*m3+m4)/6;
C3(j+1)=C3(j)+(n1+2*n2+2*n3+n4)/6;      C4(j+1)=C4(j)+(o1+2*o2+2*o3+o4)/6;
C5(j+1)=C5(j)+(p1+2*p2+2*p3+p4)/6;      C6(j+1)=C6(j)+(q1+2*q2+2*q3+q4)/6;
C7(j+1)=C7(j)+(r1+2*r2+2*r3+r4)/6;
t(j+1)=t(j)+h;      j=j+1;
end

%Duración de la etapa de fermentación discontinua
j=j-1;      tx=t(j);      x=j;

%% MODELAMIENTO DE LA FERMENTACIÓN EN CONTINUO INTEGRADA CON LA ELLM

%% Cálculos iniciales
%Concentraciones iniciales de la fase acuosa a la entrada del módulo
Cac1(1,x,1)=C5(x);      Cac2(1,x,1)=Cac1(1,x,1);
Cac1(1,x,2)=C6(x);      Cac2(1,x,2)=Cac1(1,x,2);
Cac1(1,x,3)=C7(j);      Cac2(1,x,3)=Cac1(1,x,3);
%Concentraciones iniciales de la fase solvente a la entrada del módulo
Cst1(1,x,1)=0;      Cst2(1,x,1)=Cst1(1,x,1);      Cst3(1,x,1)=Cst1(1,x,1);
Cst1(1,x,2)=0;      Cst2(1,x,2)=Cst1(1,x,2);      Cst3(1,x,2)=Cst1(1,x,2);
Cst1(1,x,3)=0;      Cst2(1,x,3)=Cst1(1,x,3);      Cst3(1,x,3)=Cst1(1,x,3);
%Concentración inicial del sto k en el tanque de fase solvente en Kg/m^3
Cstt(x,1)=Cst1(1,x,1);      %Butanol
Cstt(x,2)=Cst1(1,x,2);      %Acetona
Cstt(x,3)=Cst1(1,x,3);      %Etanol

%% Modelamiento mediante el método de Diferencias Finitas y Runge Kutta
%Balances de masa para la fermentación en continuo con recirculación(Sistema de EDO's)
g1=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R)/(1-R*S) ) *d0*C1+um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)*C1;
g2=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) (se-( (1-R)/(1-R*S) ) *C2)*d0-(k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k4+k1*(C2/(C2+ks)) * (C3/(C3+kba)) +k2*(C2/(C2+ks)) * (C4/(C4+kaa))) *C1;
g3=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R)/(1-R*S) ) *d0*C3+(k5*k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k5*k4-k6*(C2/(C2+ks)) * (C3/(C3+kba))) *C1;
g4=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R)/(1-R*S) ) *d0*C4+(k8*k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k8*k4-k9*(C2/(C2+ks)) * (C4/(C4+kaa))) *C1;
g5=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R*S*b)/(1-R*S) ) *d0*C5+(k7*k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k7*k4+k14*(C2/(C2+ks)) * (C3/(C3+kba))) *C1;
g6=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R*S*a)/(1-R*S) ) *d0*C6+(k10*k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k10*k4+k15*(C2/(C2+ks)) * (C4/(C4+kaa))) *C1;
g7=@(C1,C2,C3,C4,C5,C6,C7) -( (1-R*S*e)/(1-R*S) ) *d0*C7+k11*(k3*um*(C2/(C2+ks)) * (-0.153*(C5+C3)+2.16)+k4)*C1;

for k=1:3      %Contador del soluto

    %% Cálculo de coeficientes de transferencia de masa

    %Coeficientes de transferencia de masa para la fase solvente (kst)
    Dstot(k)=(7.4e-12)*(Mst^0.5)*T*((ust*1000)^-1)*((VM(k)*1000)^-0.6);      %Difusividad de
    cada soluto en el solvente [m^2/s]
    Rest=rost*Vst*dh/ust;      %Número de Reynolds para la fase solvente
    Scst(k)=ust/(rost*Dstot(k));      %Números de Schmidt para la fase solvente
    if Rest<2100      %Números de Sherwood para la fase solvente
        Shst(k)=1.86*(Rest*Scst(k)*dh/L)^(1/3);
    elseif (2100<Rest)&&(Rest<10000)
        Shst(k)=0.116*(Rest^(2/3)-125)*Scst(k)^(1/3)*(1+(dh/L)^(2/3));
    elseif Rest>10000
        Shst(k)=0.04*Rest^0.75*Scst(k)^0.33;
    end
    kst(k)=Shst(k)*Dstot(k)/dh;      %Coeficientes de transferencia para la fase solvente
    [m/s]

```

```

%Coeficiente de transferencia de masa para la membrana (km)
km(k)=po*Dstost(k)/(tao*d); %Coeficientes de transferencia de masa para la membrana
[m/s]

%Coeficiente de transferencia de masa para la fase acuosa (kac)
Dstow(k)=(2.98e-11)*T*((uw*1000)^-1.026)*((VM(k)*1000)^-0.5473); %Difusividad de cada
soluto en agua en m^2/s
Reac=row*Vac*dh/uw; %Número de Reynolds para la fase acuosa
Scac(k)=uw/(row*Dstow(k)); %Números de Schmidt para la fase acuosa
if Reac<2100 %Números de Sherwood para la fase acuosa
    Shac(k)=1.86*(Reac*Scac(k)*dh/L)^(1/3);
elseif (2100<Reac)&&(Reac<10000)
    Shac(k)=0.116*(Reac^(2/3)-125)*Scac(k)-(1/3)*(1+(dh/L)^(2/3));
elseif Reac>10000
    Shac(k)=0.04*Reac^0.75*Scac(k)^0.33;
end
kac(k)=Shac(k)*Dstow(k)/dh; %Coeficientes de transferencia de masa para fase acuosa
[m/s]

for j=x:z %Contador del tiempo (veces que pasa por el módulo)
    for i=1:m %Contador del espacio (Particiones en la membrana)

        %Cálculo de concentraciones a lo largo de la membrana - MÉTODO DE DIFERENCIAS
        FINITAS

        %Cálculo de flux N1 y N2
        if k==1 P1(i,j,k)=-4.8878+0.1919*Cac1(i,j,k)+0.0268*T; %P de butanol octanol
        elseif k==2 P1(i,j,k)=-0.8579+0.0535*Cac1(i,j,k)+0.0033*T; %P de acetona
        octanol
        elseif k==3 P1(i,j,k)=-0.4767+0.1310*Cac1(i,j,k)+0.0022*T; %P de etanol
        octanol

        end
        Rm(k)=1/km(k); %Resistencia de la membrana [s/m]
        Rac(i,j,k)=P1(i,j,k)/kac(k); %Resistencia de la fase acuosa [s/m]
        Rste(k)=1/kst(k); %Resistencia de la fase solvente [s/m]
        R1(i,j,k)=Rm(k)+Rac(i,j,k)+Rste(k); %Resistencia global [s/m]
        N1(i,j,k)=(P1(i,j,k)*Cac1(i,j,k)-Cst1(i,j,k))/R1(i,j,k); %Flux de soluto
        [kg/m2*s]
        N2(i,j,k)=(P1(i,j,k)*Cac1(i,j,k)-Cst2(i,j,k))/R1(i,j,k); %Flux de soluto
        [kg/m2*s]

        n1(i,j,k)=Aparef*N1(i,j,k); %Flujo de soluto [kg/s]
        n2(i,j,k)=Aparef*N2(i,j,k); %Flujo de soluto [kg/s]

        %Cálculo de flux N3 y N4
        if k==1 P2(i,j,k)=-4.8878+0.1919*Cac2(i,j,k)+0.0268*T; %P de butanol octanol
        elseif k==2 P2(i,j,k)=-0.8579+0.0535*Cac2(i,j,k)+0.0033*T; %P de acetona
        octanol
        elseif k==3 P2(i,j,k)=-0.4767+0.1310*Cac2(i,j,k)+0.0022*T; %P de etanol
        octanol

        end
        Rm(k)=1/km(k); %Resistencia de la membrana [s/m]
        Rac(i,j,k)=P2(i,j,k)/kac(k); %Resistencia de la fase acuosa [s/m]
        Rste(k)=1/kst(k); %Resistencia de la fase solvente [s/m]
        R2(i,j,k)=Rm(k)+Rac(i,j,k)+Rste(k); %Resistencia global [s/m]
        N3(i,j,k)=(P2(i,j,k)*Cac2(i,j,k)-Cst2(i,j,k))/R2(i,j,k); %Flux de soluto
        [kg/m2*s]
        N4(i,j,k)=(P2(i,j,k)*Cac2(i,j,k)-Cst3(i,j,k))/R2(i,j,k); %Flux de soluto
        [kg/m2*s]

        n3(i,j,k)=Aparef*N3(i,j,k); %Flujo de soluto [kg/s]
        n4(i,j,k)=Aparef*N4(i,j,k); %Flujo de soluto [kg/s]

        %Flujo másico de sto en cada compartimiento en la partición 'i' en kg/s
        mac1(i,j,k)=Qac*Cac1(i,j,k); %Fase acuosa 1
        mac2(i,j,k)=Qac*Cac2(i,j,k); %Fase acuosa 2
        mst1(i,j,k)=Qst*Cst1(i,j,k); %Fase solvente 1
        mst2(i,j,k)=Qst*Cst2(i,j,k); %Fase solvente 2
    end
end

```

```

mst3(i,j,k)=Qst*Cst3(i,j,k);           %Fase solvente 3

%Flujo másico de sto en cada compartimiento en la partición 'i+1' en kg/s
mac1(i+1,j,k)=mac1(i,j,k)-n1(i,j,k)-n2(i,j,k);           %Fase acuosa 1
mac2(i+1,j,k)=mac2(i,j,k)-n3(i,j,k)-n4(i,j,k);           %Fase acuosa 2
mst1(i+1,j,k)=mst1(i,j,k)+n1(i,j,k);                     %Fase solvente 1
mst2(i+1,j,k)=mst2(i,j,k)+n2(i,j,k)+n3(i,j,k);           %Fase solvente 2
mst3(i+1,j,k)=mst3(i,j,k)+2*n4(i,j,k);                   %Fase solvente 3

%Concentración de sto en cada compartimiento en la partición 'i+1' en kg/m^3
Cac1(i+1,j,k)=mac1(i+1,j,k)/Qac;                           %Fase acuosa 1
Cac2(i+1,j,k)=mac2(i+1,j,k)/Qac;                           %Fase acuosa 2
Cst1(i+1,j,k)=mst1(i+1,j,k)/Qst;                           %Fase solvente 1
Cst2(i+1,j,k)=mst2(i+1,j,k)/Qst;                           %Fase solvente 2
Cst3(i+1,j,k)=mst3(i+1,j,k)/Qst;                           %Fase solvente 3
end

%Datos adicionales para completar las matrices
N1(i+1,j,k)=0;   n1(i+1,j,k)=0;
N2(i+1,j,k)=0;   n2(i+1,j,k)=0;
N3(i+1,j,k)=0;   n3(i+1,j,k)=0;
N4(i+1,j,k)=0;   n4(i+1,j,k)=0;

%% Cálculo de concentraciones en el fermentador en cada iteración j - MÉTODO RUNGE KUTTA

%Relaciones de concentración a la entrada y salida del módulo
r(j,k)=(Cac1(m,j,k)+Cac2(m,j,k))/(Cac1(1,j,k)+Cac2(1,j,k));
if k==1
    a=r(j,k);
elseif k==2
    b=r(j,k);
else e=r(j,k);
end

%Relaciones de flujo másico a la entrada y salida del módulo
s(j)=(sum(mac1(m,j,:))+sum(mac2(m,j,:)))/(sum(mac1(1,j,:))+sum(mac2(1,j,:)));
S=s(j);

%Constantes 1
l1=h*g1(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
m1=h*g2(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
n1=h*g3(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
o1=h*g4(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
p1=h*g5(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
q1=h*g6(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
r1=h*g7(C1(j),C2(j),C3(j),C4(j),C5(j),C6(j),C7(j));
%Constantes 2
l2=h*g1(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
m2=h*g2(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
n2=h*g3(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
o2=h*g4(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
p2=h*g5(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
q2=h*g6(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
r2=h*g7(C1(j)+l1/2,C2(j)+m1/2,C3(j)+n1/2,C4(j)+o1/2,C5(j)+p1/2,C6(j)+q1/2,C7(j)+r1/2);
%Constantes 3
l3=h*g1(C1(j)+l2/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);
m3=h*g2(C1(j)+l2/2,C2(j)+m2/2,C3(j)+n2/2,C4(j)+o2/2,C5(j)+p2/2,C6(j)+q2/2,C7(j)+r2/2);

```

```

n3=h*g3 (C1 (j) +l2/2, C2 (j) +m2/2, C3 (j) +n2/2, C4 (j) +o2/2, C5 (j) +p2/2, C6 (j) +q2/2, C7 (j) +r2/2);
o3=h*g4 (C1 (j) +l2/2, C2 (j) +m2/2, C3 (j) +n2/2, C4 (j) +o2/2, C5 (j) +p2/2, C6 (j) +q2/2, C7 (j) +r2/2);
p3=h*g5 (C1 (j) +l2/2, C2 (j) +m2/2, C3 (j) +n2/2, C4 (j) +o2/2, C5 (j) +p2/2, C6 (j) +q2/2, C7 (j) +r2/2);
q3=h*g6 (C1 (j) +l2/2, C2 (j) +m2/2, C3 (j) +n2/2, C4 (j) +o2/2, C5 (j) +p2/2, C6 (j) +q2/2, C7 (j) +r2/2);
r3=h*g7 (C1 (j) +l2/2, C2 (j) +m2/2, C3 (j) +n2/2, C4 (j) +o2/2, C5 (j) +p2/2, C6 (j) +q2/2, C7 (j) +r2/2);
%Constantes 4
l4=h*g1 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
m4=h*g2 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
n4=h*g3 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
o4=h*g4 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
p4=h*g5 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
q4=h*g6 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
r4=h*g7 (C1 (j) +l3, C2 (j) +m3, C3 (j) +n3, C4 (j) +o3, C5 (j) +p3, C6 (j) +q3, C7 (j) +r3);
%Concentraciones y tiempo en j+1
C1 (j+1)=C1 (j) + (l1+2*l2+2*l3+l4) /6;          C2 (j+1)=C2 (j) + (m1+2*m2+2*m3+m4) /6;
C3 (j+1)=C3 (j) + (n1+2*n2+2*n3+n4) /6;          C4 (j+1)=C4 (j) + (o1+2*o2+2*o3+o4) /6;
C5 (j+1)=C5 (j) + (p1+2*p2+2*p3+p4) /6;          C6 (j+1)=C6 (j) + (q1+2*q2+2*q3+q4) /6;
C7 (j+1)=C7 (j) + (r1+2*r2+2*r3+r4) /6;          t (j+1)=t (j) +h;

%Concentración en j+1 del sto k en tanque de fase solvente en Kg/m^3
Cstt (j+1, k) = ((2*Cst1 (m, j, k) +2*Cst2 (m, j, k) +Cst3 (m, j, k)) /5) *5*Qst*trst+Cstt (j, k) * (Vtst-
5*Qst*trst) /Vtst;

%Concentración a la entrada del módulo del sto k para cada fase en j+1 en Kg/m^3
if k==1
    Cac1 (1, j+1, k) =C5 (j+1);          %Butanol en fase acuosa 1
elseif k==2
    Cac1 (1, j+1, k) =C6 (j+1);          %Acetona en fase acuosa 1
else Cac1 (1, j+1, k) =C7 (j+1);          %Etanol en fase acuosa 1
end
Cac2 (1, j+1, k) =Cac1 (1, j+1, k);      %Solute en fase acuosa 2
Cst1 (1, j+1, k) =Cstt (j+1, k);          %Solute en fase solvente 1
Cst2 (1, j+1, k) =Cstt (j+1, k);          %Solute en fase solvente 2
Cst3 (1, j+1, k) =Cstt (j+1, k);          %Solute en fase solvente 3
end
end
t=t/3600;

%% Figuras

%Figura 1
figure
plot (t, C1, 'm')
hold on
plot (t, C2, 'k')
grid
title ('Variación de la concentración de biomasa y sustrato en el tiempo')
xlabel ('Tiempo [horas]') ylabel ('Concentración [Kg/m^3]')
legend ('[X]', '[S]', 'Location', 'SouthEastOutside')
hold off

%Figura 2
figure
plot (t, C3, 'g');
hold on
plot (t, C4, 'b');
grid
title ('Variación de la concentración de ácido butírico y ácido acético en el tiempo')
xlabel ('Tiempo [horas]') ylabel ('Concentración [Kg/m^3]')
legend ('[AB]', '[AA]', 'Location', 'SouthEastOutside')
hold off

```

```

%Figura 3
figure
plot(t,C5,'r');
hold on
plot(t,Cstt(:,1),':r');
plot(t,C6,'b');
plot(t,Cstt(:,2),':b');
plot(t,C7,'k');
plot(t,Cstt(:,3),':k');
grid
title('Variación de la concentración de acetona, butanol y etanol en las fases acuosa y
solvente en el tiempo')
xlabel('Tiempo [horas]') ylabel('Concentración [Kg/m^3]')
legend ('[B]ac','[B]st','[A]ac','[A]st','[E]ac','[E]st','Location','SouthEastOutside')
hold off

```

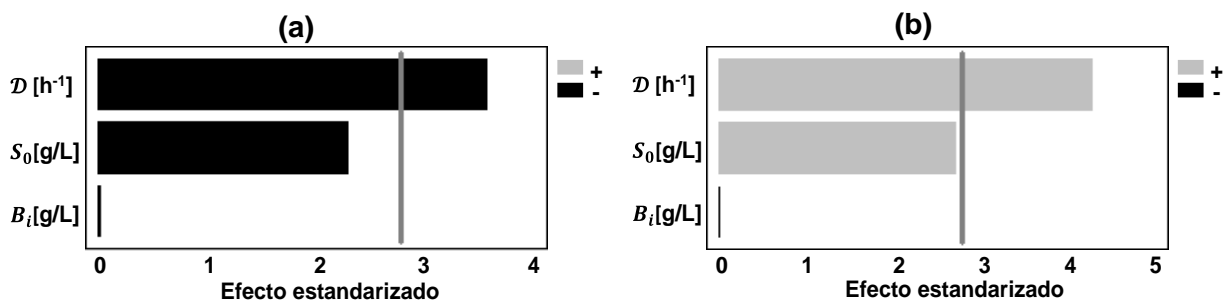
Anexo C. Análisis de influencia del proceso integrado

Al simular el proceso integrado con el diseño experimental que se mostró en la Tabla 6 (pág. 10), se obtuvieron los resultados mostrados a continuación.

Resultados de la simulación integrada en Matlab® del análisis de influencia.

B_i [g/L]	S_0 [g/L]	$\mathcal{D} = 0,06h^{-1}$		$\mathcal{D} = 0,6h^{-1}$	
		X_S	PR_B [g/L · h]	X_S	PR_B [g/L · h]
8,2	20	0,993	0,373	0,773	1,185
	70	0,949	0,631	0,151	2,854
10,4	20	0,990	0,380	0,773	1,185
	70	0,952	0,619	0,152	2,854

Con estos datos se realizó un análisis de influencia por medio del software Statgraphics Centurion XVI® y se obtuvieron los diagramas de Pareto mostrados en la siguiente figura.



Diagramas de Pareto para el estudio de influencia de D , S_0 y B_i sobre (a) X_S y (b) PR_B