



## SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIOETANOL A PARTIR DE LA MEZCLA GLUCOSA/XILOSA INCLUYENDO LOS EFECTOS DE TEMPERATURA, PH Y CONCENTRACIÓN DE AZÚCARES

### SIMULATION OF THE BIOETHANOL PRODUCTION PROCESS FROM A MIXTURE OF GLUCOSE/XYLOSE INCLUDING TEMPERATURE, PH AND SUGAR CONCENTRATION EFFECTS

J.N. Reyes-Valadez<sup>1\*</sup>, P.A. Quintana-Hernández<sup>1</sup>, C. Coronado-Velasco<sup>1</sup> y A. J. Castro-Montoya<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Ingeniería Química, Instituto Tecnológico de Celaya. Av. Tecnológico y García Cubas S/N. Celaya, Gto. México.

<sup>2</sup>Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo. Av. Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria. Morelia, Michoacán, México

Recibido 8 de diciembre de 2013; Aceptado 13 de octubre de 2014

#### Resumen

En este trabajo se propone un modelo modificado para la producción de bioetanol basado en la ecuación cinética de Monod. El modelo incluye los efectos de inhibición de sustrato y producto, la limitación de sustrato y algunos pseudo parámetros que son función de las condiciones de operación: temperatura, pH y concentración de glucosa y xilosa. A partir de datos experimentales reportados en la literatura se lleva a cabo un análisis multivariable con el cual se ajustan los pseudo parámetros. Los resultados de las simulaciones con el modelo propuesto son comparados contra los datos experimentales, y contra un modelo de parámetros constantes reportado en la literatura. El error promedio obtenido con el modelo propuesto es menor que el error generado con el modelo reportado y reproduce las variables de proceso a diferentes condiciones de operación con un error promedio del 8.2%.

*Palabras clave:* biocombustibles, glucosa, modelos, optimización de parámetros, producción de etanol, xilosa.

#### Abstract

In this paper it is proposed a modified bioethanol production model that it is based on the Monod kinetic equation. The model includes the effects of substrate and product inhibition, substrate limitation and some pseudo parameters that are function of the operation conditions: temperature, pH and glucose-xylose concentration. From experimental data reported in the literature it was performed a multivariate analysis, fitting the pseudo parameters. The simulation results with the proposed model are compared against experimental data and against a constant parameter model reported in the literature. The average error obtained with the proposed model is less than the error generated by the model reported in the literature and reproduces the process variables at different operating conditions with an average error of 8.2%.

*Keywords:* biofuels, glucose, models, parameter optimization, ethanol production, xylose.

## 1 Introducción

Mucho se ha hablado sobre la problemática de los combustibles fósiles, en parte debido a la contaminación que inevitablemente se deriva por su uso. Las emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera, consideradas como una de las fuentes que contribuyen mayoritariamente al calentamiento global del planeta, pueden tener consecuencias desastrosas para ciertas regiones produciendo sequías e inundaciones. Una alternativa para reducir el volumen total de CO<sub>2</sub> que se emite a la atmósfera, es el uso de biocombustibles. Estos se obtienen de manera renovable a partir de

restos orgánicos que absorben CO<sub>2</sub> a medida que crecen, emitiendo prácticamente la misma cantidad que los combustibles convencionales cuando se queman, lo que se produce un proceso de ciclo cerrado. Dentro de estos biocombustibles se encuentra el bioetanol, que mezclado con la gasolina produce un biocombustible con características muy similares a la gasolina. Además usado a concentraciones del 5 o el 10% no se requieren modificaciones en los motores actuales.

Actualmente en México, la bioenergía representa el 8% del consumo de energía primaria. Los principales bioenergéticos empleados son el bagazo de

\* Autor para la correspondencia. E-mail: black.geko@hotmail.com

caña (usado para la generación eléctrica y/o térmica en la industria azucarera) y la leña (fundamentalmente usada para calefacción y cocción de alimentos). Además, se cuenta con un área agrícola significativa, potencialmente apta para la producción de bioetanol y biodiesel (Red Mexicana de Bioenergía, 2005). En México, desde hace varios años, se produce etanol de caña de azúcar en los diferentes ingenios del país que cuentan con destilerías, sólo que su uso es para bebidas embriagantes e industriales, no para uso combustible. Se produce, principalmente, de melazas de caña de azúcar y con una tecnología tradicional y bastante conocida. Sin embargo, a pesar de tener la capacidad para producir mayor cantidad, los ingenios del país no la utilizan (ver tabla 1), debido a que la demanda es limitada y que el insumo es cíclico.

La Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación (FAO), a declarado que México forma parte de los países de América Latina y el Caribe (ALC) con alta disponibilidad de tierra arable para expansión agrícola (entre 6 y 343 millones de hectáreas). De modo que es posible la expansión de cualquier tipo de agricultura, mediante el esquema de desarrollo sostenible, incluso para proveer alimentos y biocombustibles a otros países (Bot y col., 2008). De acuerdo con la Secretaría de Energía (SENER, 2006), la reducción de las importaciones de gasolina y metil ter-butil éter (MTBE) en el caso de que todas las gasolinas en México fueran mezclas del 10% de etanol, supondría un ahorro en la balanza de pagos

de hasta US\$ 2.0 mil millones. La venta de bonos de carbono a través de proyectos del Mecanismo de Desarrollo Limpio (MDL) podría potencialmente añadirse a este beneficio. Para el escenario de mayor penetración de etanol se esperaría una mitigación de 10.6 millones ton CO<sub>2</sub> eq/año con base en una producción a partir de caña de azúcar. El impacto del uso de bioetanol en la reducción de gases de efecto invernadero en México, pueden verse en la tabla 2.

Por otra parte, es importante señalar que el bioetanol se consume de un 25% a un 30% más rápido que la gasolina, y que para ser competitivo debe tener un menor precio. Así que para que el bioetanol contribuya perceptiblemente a las necesidades de combustible, debe tener un balance energético neto positivo. De modo que para hacer del bioetanol una alternativa viable, se hace necesaria la optimización del proceso y para ello es indispensable el uso de modelos que ayuden a predecir los niveles de producción de bioetanol.

En la literatura se han reportado varios modelos para la producción de bioetanol, no obstante los modelos existentes tienen el inconveniente de ser poco generalizables, además de emplear parámetros específicos constantes para cada prueba sin posibilidad de tomar en cuenta las condiciones de operación. De modo que estos modelos solo reproducen adecuadamente un conjunto específico de condiciones de operación.

Tabla 1. Producción de Etanol en México y capacidad instalada, ciclo 2002 - 2003 expresada en Litros/ciclo agrícola (SENER, 2004).

Ingenio	Capacidad instalada	Producción	Capacidad utilizada (%)
Aarón Sáenz	8 550 000	4 948 000	57.9
Calipam	2 400 000	990 261	41.3
Constancia	9 000 000	4 997 400	55.5
El Carmen	5 400 000	2 923 000	54.1
El Mante	7 200 000	5 082 300	70.6
Independencia	4 500 000	1 250 908	27.8
La Joya	4 200 000	1 307 000	31.1
La Providencia	7 500 000	1 818 471	24.2
Pujilic	6 000 000	3 373 004	56.2
San José de Abajo	7 500 000	1 118 000	14.9
San Nicolás	12 000 000	2 547 683	21.2
San Pedro	7 500 000	3 206 000	42.8
Tamazula	7 500 000	5 643 750	75.3
Total	89 250 000	39 205 777	43.9

Tabla 2. Impactos esperados en las emisiones de GEI en México con la introducción de 10% de etanol en la gasolina, los valores para el año 2004. \*Considerando que las emisiones por gasolina como 2.8 kg CO<sub>2</sub> eq. / l, y la equivalencia (en volumen) de los dos combustibles.

	Emisión de GEI (kg de CO <sub>2</sub> eq./l de etanol)		Mitigación de las emisiones de GEI 10 <sup>6</sup> ton CO <sub>2</sub> eq. /año
	Producción de etanol	Emisiones netas evitadas*	
Maíz	1.8	1.0	3.9
Caña de azúcar	0.43	2.72	10.6
Remolacha	1.4	1.4	5.4
Sorgo	0.7	2.1	8.2
Trigo	1.8	1.0	3.9

Por esta razón, el objetivo principal de este trabajo es obtener un modelo para la producción de bioetanol a partir de glucosa y xilosa que permita tomar en cuenta los efectos de pH, temperatura y concentración de glucosa y xilosa en el proceso de fermentación, posibilitando la optimización del proceso de fermentación.

## 2 Modelos previamente reportados

En la literatura se encuentran reportados varios modelos para la producción de etanol a partir de glucosa y xilosa. Meintjes (2011) presenta un resumen cronológico con la evolución que han seguido los modelos basados en la ecuación cinética de Monod desde 1949 a 1997. Con el paso de los años se han incluido al modelo original, los términos de inhibición y limitación con la consideración generalizada de procesos de fermentación llevados a cabo a condiciones constantes. Una variante al modelo cinético de Monod fue presentada por Escamilla y col. (1997), quienes tomaron como base el modelo de Gompertz tomando como base los postulados de la cinética clásica de evolución poblacional. Este modelo tiene el inconveniente de que pequeñas variaciones en los parámetros pueden generar grandes variaciones en las estimaciones de la biomasa, debido a que la ecuación incluye términos exponenciales elevados a otro exponencial.

Para la producción de bioetanol a partir de glucosa y xilosa se han empleado diferentes levaduras, reportando valores óptimos para diferentes condiciones de operación. Krishnan y col. (1999), emplearon *Saccharomyces cerevisiae* y encontraron que solamente se transformaba la glucosa de manera eficiente, pues en el consumo de xilosa los efectos de inhibición son mas pronunciados. El nivel máximo de rendimiento fue de 0.46 g de etanol/g azúcar.

Por otra parte, Rogers y col. (2000) llevaron a cabo la fermentación de diferentes mezclas glucosa/xilosa a varias condiciones de temperatura

y pH con levadura *Zymomonas mobilis*, notable por su capacidades de producción de bioetanol y que además posee la característica de ser susceptible de manipulaciones genéticas (Zhang y col. 1995), lo que le confiere la habilidad de degradar tanto glucosa como xilosa. A diferencia de los experimentos con *Saccharomyces cerevisiae* las *Zymomonas mobilis* modificadas fueron capaces de transformar la mezcla de glucosa y xilosa con rendimientos de 0.48 g de etanol/g azúcar.

Leksawasdi y col. (2001) propusieron un modelo basado en la ecuación de Monod que incluía los términos de limitación e inhibición de sustrato así como la limitación del producto. Además, contenía un factor de optimización que les permitía reducir el error entre experimentos a diferentes condiciones de operación. Este factor fue asociado a la fracción de glucosa y fue fijado en 0.65, lo cual no es físicamente posible ya que la fracción de glucosa cambia desde un valor inicial de 1 si solo se emplea glucosa en las pruebas hasta un valor cercano a cero cuando se ha consumido casi por completo la misma. Este hecho representa una desventaja del modelo presentado por Leksawasdi y col. (2001).

## 3 Metodología

Para desarrollar el modelo que se propone en este trabajo se parte del modelo reportado por Rogers y col. (1999) y Leksawasdi y col. (2001). Este modelo incluye en su cinética tres parámetros que afectan sensiblemente el proceso de fermentación: tasa específica de crecimiento,  $\mu$ ; tasa específica de consumo de sustrato,  $q_s$  y tasa específica de producción de etanol  $q_p$ . Para incluir el efecto del pH en el modelo, se modificaron dichos parámetros como

se muestra en las ecuaciones (1-3).

$$\mu = \frac{\mu_{\max} S}{K_s \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S} \quad (1)$$

$$q_p = \frac{q_{p\max} S}{K_s \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S} \quad (2)$$

$$q_s = \frac{\mu_{s\max} S}{K_s \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S} \quad (3)$$

Para incluir el efecto de la temperatura, se probó un símil de la ecuación Arrhenius en los parámetros  $\mu$ ,  $q_s$  y  $q_p$ . La ecuación (4) muestra la dependencia de cada parámetro ( $Par_i$ ) con la temperatura.

$$Par_i = A_{Par_i} \exp\left(-\frac{Ea_{Par_i}}{RT}\right) \quad (4)$$

Donde  $Par_i$  podía ser  $\mu$ ,  $q_s$  y  $q_p$ ;  $A$  es el coeficiente pre-exponencial,  $Ea$  la energía de activación,  $R$  la constante universal de los gases y  $T$  la temperatura. Al ser un símil,  $Ea$  no representa propiamente una energía de activación sino de una pseudo-energía de activación.

Usando los datos reportados por Rogers y col. (1999), y Leksawasdi y col. (2001) se realizó una regresión no lineal para ajustar los valores de los coeficientes pre-exponencial y la pseudo-energías de activación. Sin embargo se obtuvieron bajos niveles de reproducibilidad, por lo que se descartó esta forma de variación de parámetros con respecto a la temperatura.

Dado que no fue posible introducir los efectos de temperatura con la aproximación anterior, se procedió a modificar las ecuaciones cinéticas usando pseudo parámetros que contemplaran efectos lineales para pH, temperatura y concentración de azúcares para los

parámetros  $\mu'$ ,  $q'_s$  y  $q'_p$ , siguiendo el comportamiento de la ecuación (5). Además se consideró el cálculo de pseudo parámetros para los parámetros de inhibición de producto ( $P_{\max}$ ,  $P_{iX}$ ,  $P_{iS}$  y  $P_{iP}$ ) siguiendo el comportamiento de la ecuación (6). Es importante señalar que los tres primeros pseudo parámetros son afectados por la concentración de glucosa y xilosa de manera individual mientras que los últimos cuatros son afectados por la relación de concentraciones de glucosa y xilosa.

$$Pseudo - par_i = C_1 + C_2 \cdot S_g + C_3 \cdot S_x + C_4 \cdot pH + C_5 \cdot T \quad (5)$$

$$Pseudo - par_j = D_1 + D_2 \cdot S_{g/x} + D_3 \cdot T + D_4 \cdot pH \quad (6)$$

Las constantes  $C'_s$  y  $D'_s$  representan los coeficientes de ajuste,  $S_g$  la concentración de glucosa,  $S_x$  la concentración de xilosa,  $S_{g/x}$  la concentración de la mezcla glucosa/xilosa,  $pH$  el valor del potencial y  $T$  la temperatura. Los coeficientes  $C'_s$  y  $D'_s$  son obtenidos mediante un proceso de optimización de parámetros usando Minitab® y teniendo como función objetivo la minimización de la suma de cuadrados del error global.

A continuación se presenta el modelo propuesto (Reyes, 2010) formado por cuatro ecuaciones diferenciales que permiten el cálculo de la biomasa formada,  $X$ , el bioetanol producido,  $P$ , y la concentración de glucosa y xilosa,  $S_g$ ,  $S_x$  en función del tiempo. En la tablas 3 y 4 se muestran los coeficientes para el cálculo de los pseudo parámetros como función de las variables de operación ( $S_g$ ,  $S_x$ ,  $pH$ , y  $T$ ). Los valores de las constantes  $K_{ij}$  son los mismos que los reportados en los trabajos Rogers y col. (1999) y Leksawasdi y col. (2001).

$$\frac{dX}{dt} = \left[ \mu'_{\max,g} \left( \frac{S_g}{K_{SX,g} \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S_g} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iX,g}}{P_{\max} - P_{iX,g}} \right) \left( \frac{K_{iX,g}}{K_{iX,g} + S_g} \right) + \mu'_{\max,x} \left( \frac{S_x}{K_{SX,x} \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S_x} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iX,x}}{P_{\max} - P_{iX,x}} \right) \left( \frac{K_{iX,x}}{K_{iX,x} + S_x} \right) \right] X \quad (7)$$

$$\frac{dP}{dt} = \left[ q'_{P\max,g} \left( \frac{S_g}{K_{SP,g} \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S_g} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iP,g}}{P_{\max} - P_{iP,g}} \right) \left( \frac{K_{iP,g}}{K_{iP,g} + S_g} \right) + q'_{P\max,x} \left( \frac{S_x}{K_{SP,x} \left(1 + \frac{H_i}{K_b}\right) + S_x} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iP,x}}{P_{\max} - P_{iP,x}} \right) \left( \frac{K_{iP,x}}{K_{iP,x} + S_x} \right) \right] X \quad (8)$$

$$\frac{dS_g}{dt} = \left[ -q'_{smax,g} \left( \frac{S_g}{K_{SS,g} \left( 1 + \frac{H_I}{K_b} \right) + S_g} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iS,g}}{P_{max} - P_{iS,g}} \right) \left( \frac{K_{iS,g}}{K_{iS,g} + S_g} \right) \right] X \quad (9)$$

$$\frac{dS_x}{dt} = \left[ -q'_{smax,x} \left( \frac{S_x}{K_{SS,x} \left( 1 + \frac{H_I}{K_b} \right) + S_x} \right) \left( 1 - \frac{P - P_{iS,x}}{P_{max} - P_{iS,x}} \right) \left( \frac{K_{iS,x}}{K_{iS,x} + S_x} \right) \right] X \quad (10)$$

Tabla 3. Coeficientes  $C'_s$  de los pseudo-parámetros  $\mu'$ ,  $q'_s$  y  $q'_p$ .

	$\mu'_{max,g}$	$\mu'_{max,x}$	$q'_{smax,g}$	$q'_{smax,x}$	$q'_{pmax,g}$	$q'_{pmax,x}$
Intersección	-0.3760	0.0097	-25.2400	1.6235	-8.9315	0.8972
Glucosa	-0.0142	-0.0020	-0.6907	-0.0888	-0.3109	-0.0398
Xilosa	0.0126	0.0023	0.5962	0.0944	0.2699	0.0432
pH	0.1561	0.0073	2.0240	-0.1698	0.5075	-0.1088
Temperatura	-0.0037	-0.0012	0.9171	-0.0076	0.4012	-0.0041
R <sup>2</sup>	0.92	0.92	0.94	0.95	0.96	0.95

Tabla 4. Coeficientes de los parámetros  $P_{max}$ ,  $P_{iX}$  y  $P_{iPS}$ .

	$P_{max}$	$P_{iX,g}$	$P_{iX,x}$	$P_{iPS,g}$	$P_{iPS,x}$
Intersección	425.0755	263.4115	731.5468	281.7875	396.3301
Mezcla G/X	0.5254	0.2278	0.1092	0.3680	0.4227
Temperatura	-1.2609	-0.7626	-2.1818	-0.8349	-1.2005
pH	-8.0129	-5.6813	-9.9101	-6.1711	-5.5166
R <sup>2</sup>	0.99	0.96	0.97	0.99	0.99

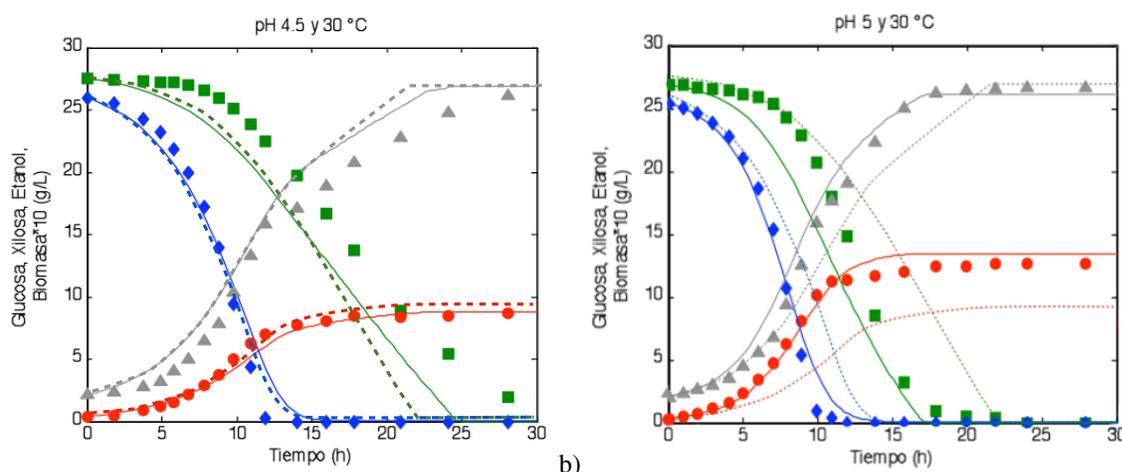


Fig. 1. Comparación de los datos experimentales contra la simulación del modelo propuesto y el modelo de Leksawasdi y col. (2001) a 30°C. Los valores puntuales son datos experimentales ■, Glucosa; ♦, Xilosa; ▲, Etanol; ●, Biomasa, las líneas sólidas son los datos generados por el modelo propuesto y las líneas discontinuas son los datos generados por el modelo de Leksawasdi y col. (2001).

## 4 Resultados

Las primeras modificaciones al modelo mostraron que el incluir el efecto del pH solamente, no era suficiente para reproducir los datos experimentales en el intervalo considerado; tampoco fue posible

reproducir los datos experimentales con variaciones en la temperatura siguiendo un comportamiento del tipo de la ecuación de Arrhenius. Sin embargo, con el uso de los pseudo parámetros sí fue posible reproducir el proceso de fermentación. Para probar el modelo se llevaron a cabo simulaciones a diferentes condiciones

de operación. En las Figs.(1-3), se muestran los resultados que permiten la comparación del modelo de Leksawasdi y col., con el modelo propuesto y los datos experimentales reportados en la literatura.

En la Fig. (1A) se observa que a pH 4.5 y 30° C, el modelo propuesto se ajusta adecuadamente a los datos experimentales del consumo de glucosa y producción biomasa, de la misma forma que el modelo de Leksawasdi y col. (2001). Sin embargo en la simulación del consumo de xilosa y producción de etanol, se presentan las mayores variaciones. El máximo error obtenido por modelo propuesto fue de 14.8 %, contra 15.8 % del modelo de Leksawasdi y col., ambos porcentajes de error correspondieron a la concentración de xilosa.

En la Fig. (1B) se puede observar que a pH

5 el consumo de xilosa en el modelo propuesto es mas rápido en las primeras horas de la fermentación, comparado con los datos experimentales. Por otro lado, también se observa que el modelo de Leksawasdi y col. (2001) ya no es capaz de representar adecuadamente las cinéticas de la fermentación, esto debido a que las condiciones ya no son las mismas a las que fue desarrollado dicho modelo. En este caso los errores máximos para la producción de biomasa y la concentración de xilosa son 33.3% y 20.9% respectivamente con el modelo de Leksawasdi y col. Los errores encontrados con el modelo propuesto para los mismos parámetros fueron de 5.1 % y 14.9%. Los porcentajes de error para las otras variables se encuentran reportados en la tabla 5.

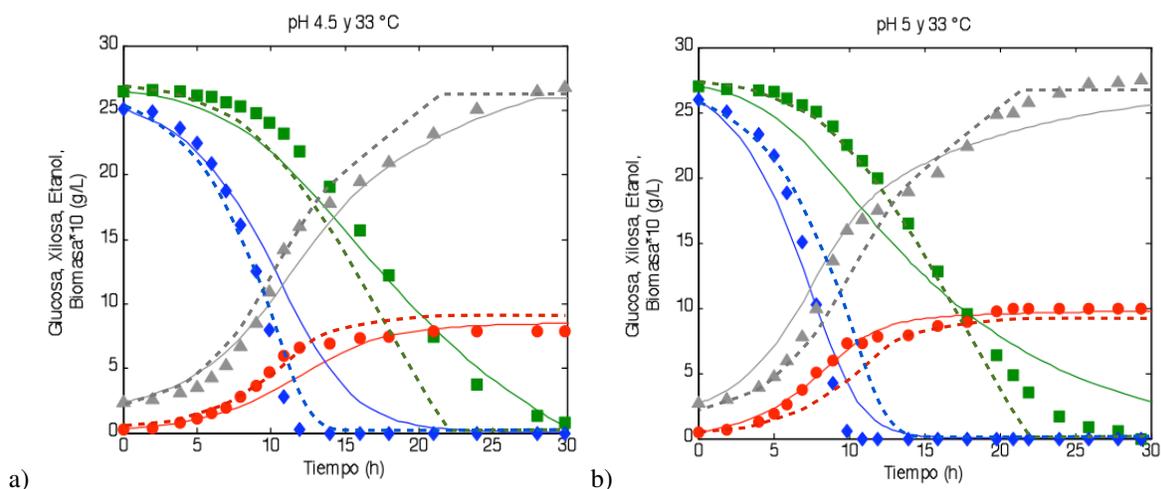


Fig. (2). Comparación de los datos experimentales contra la simulación del modelo propuesto y el modelo de Leksawasdi y col. (2001) a 33°C. Los valores puntuales son datos experimentales ■, Glucosa; ♦, Xilosa; ▲, Etanol; ●, Biomasa, las líneas sólidas son los datos generados por el modelo propuesto y las líneas discontinuas son los datos generados por el modelo de Leksawasdi y col. (2001).

Tabla 5. Errores porcentuales de las simulaciones obtenidas con el modelo propuesto y el Leksawasdi y col. (2001). Donde  $S_x$  es la concentración de xilosa,  $S_g$  la concentración de glucosa, E la concentración de etanol y B la concentración de biomasa.

Temp.	pH	Modelo Leksawadi				Modelo Propuesto			
		$S_x$	$S_g$	E	B	$S_x$	$S_g$	E	B
30 °C	4.5	15.8	0.8	14.8	6.3	14.8	3.2	13.3	2.4
	5.0	20.9	22.5	8.7	33.3	14.9	3.8	5.6	5.1
33 °C	4.5	11.8	1.3	8.5	12.6	4.2	20.8	2.0	7.6
	5.0	5.2	25.5	1.2	10.8	2.9	0.4	2.0	3.0
37 °C	5.0	29.9	16.8	22.7	53.4	1.4	17.1	5.4	34.4

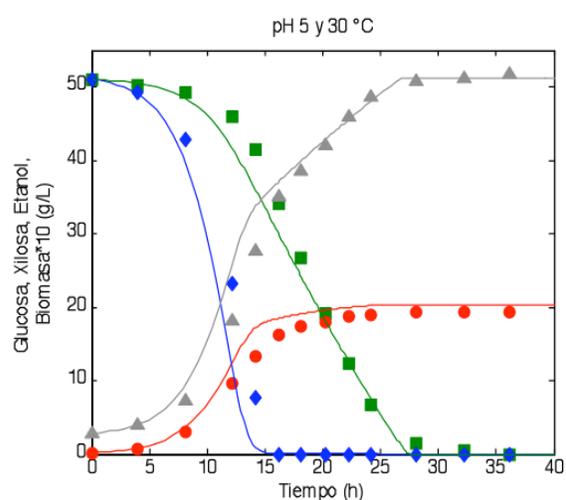
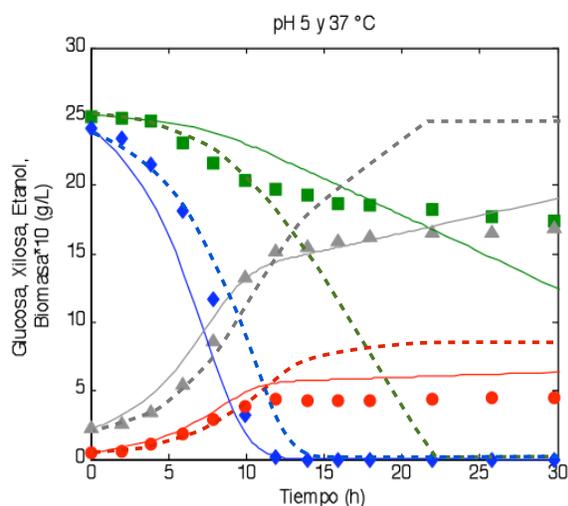
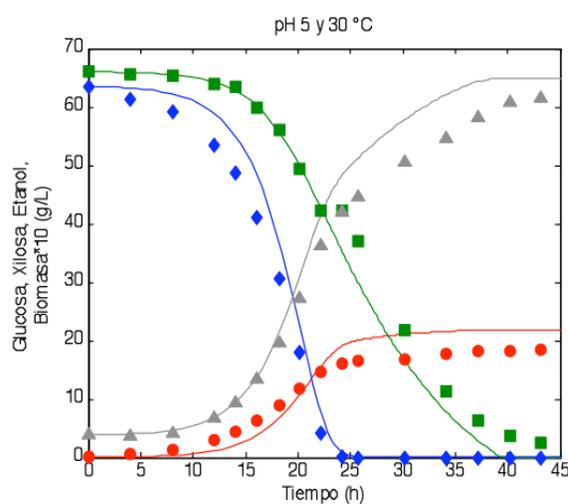


Fig. (3). Comparación de los datos experimentales contra la simulación del modelo propuesto y el modelo de Leksawasdi y col. (2001) a 37°C. Los valores puntuales son datos experimentales ■, Glucosa; ◆, Xilosa; ▲, Etanol; ●, Biomasa, las líneas sólidas son los datos generados por el modelo propuesto y las líneas discontinuas son los datos generados por el modelo de Leksawasdi y col. (2001).

En la simulación a pH 4.5 y 33° C, el ajuste para el consumo de la xilosa mejora notablemente (Fig. (2A)). Sin embargo el error máximo aumenta, debido a que en la simulación, el consumo de glucosa se vuelve mas lento de lo que indican los datos experimentales. A 33 °C y pH 5, la simulación para el consumo de xilosa presenta algunas diferencias respecto a los datos experimentales pero exhibe un comportamiento consistente con los mismos (Fig. (2B)). No obstante, el modelo propuesto representa mejor las cinéticas de la producción de biomasa y etanol. Los errores fueron de: 3% en la simulación de la biomasa para el modelo propuesto y de 25.5% en la simulación de glucosa para el modelo de Leksawasdi y col.

En la Fig. (3) se puede observar como el modelo de Leksawasdi y col. falla en predecir el comportamiento de la fermentación a 37 °C, sobre todo en las cinéticas para la producción de biomasa y consumo de xilosa. Mientras que los datos experimentales muestran, que después de 30 horas aún no se consumió la xilosa. El modelo de Leksawasdi y col. predice que se consume totalmente aproximadamente a las 22 hrs. Por otro lado, el modelo propuesto presenta un buen ajuste para el consumo de glucosa y la producción de biomasa y etanol, sin embargo la cinética de la xilosa no puede ser representada en la etapa final de

a)



b)

Fig. 4. Comparación de los datos experimentales contra la simulación del modelo propuesto y las nuevas consideraciones a concentraciones glucosa/xilosa de 50/50 g/L (A) y 65/65 g/L (B). Los valores puntuales son datos experimentales ■, Glucosa; ◆, Xilosa; ▲, Etanol; ●, Biomasa, las líneas sólidas son los datos generados por el modelo propuesto.

la fermentación. Los errores para el modelo propuesto y el modelo de Leksawasdi y col., son 34.3% y 53.4% respectivamente, ambos en la simulación del consumo de xilosa.

Para corroborar la robustez del modelo, éste se probó con datos de fermentaciones a cantidades

Tabla 6. Errores porcentuales de las simulaciones obtenidas con el modelo propuesto contra los datos experimentales reportados por Leksawadi y col. (2001), a concentraciones distintas de sustrato.

Mezcla G/X	Sx	Sg	E	B
50/50	3.9	12.7	11.7	6.4
65/65	6.3	15.1	4.0	11.5

iniciales de sustrato de 50g/50g y 65g/65g. La Figura 4 muestra los resultados con estas concentraciones iniciales.

El efecto por el cambio en la cantidad de sustrato alimentado está siendo bien representado por el modelo. Las diferencias más notorias ocurren a 65g/65g (Fig. 4 (B)) en donde se puede ver que el consumo total de xilosa ocurre a las 40 hrs para el modelo propuesto mientras que en los datos experimentales esto ocurre aproximadamente a las 45 hrs. El error máximo para la fermentación con la relación 65g/65g fue de 12.7%, mientras que para la relación 50g/50g fue de 15.1%, ambos en la cinética del consumo de glucosa. Los errores para los otros perfiles aparecen en la tabla 6.

## Conclusiones

El empleo de pseudo-parámetros en el modelo propuesto ha permitido generar un modelo flexible en función de las variables de operación (pH, temperatura y concentración de glucosa y xilosa). La inclusión separada de los efectos de pH y temperatura no son suficientes para reproducir los datos experimentales con los modelos originales. Pero con el uso de los pseudo-parámetros se tiene ahora la posibilidad de variar las condiciones de operación para generar un perfil óptimo de fermentación. Los errores generados con el modelo propuesto resultaron en todos los casos analizados menores a los producidos al usar el modelo de Leksawadi y col. Los parámetros  $P_{max}$ ,  $P_{iX}$ ,  $P_{iS}$  y  $P_{iP}$  presentan una dependencia importante al cambio de temperatura, pH y concentración de sustrato, por lo que es recomendable realizar experimentos a otras condiciones para contar con más datos experimentales y tratar de afinar los pseudo-parámetros que predigan de mejor manera las cinéticas del proceso de fermentación.

## Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) y a la Dirección General de Educación

Superior Tecnológica por los apoyos otorgados para llevar a cabo el presente trabajo.

## Nomenclatura

$A$	coeficiente pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius
$C'_s$	coeficientes de ajuste para $\mu'$ , $q'_s$ y $q'_p$
$D'_s$	coeficientes de ajuste para $P_{max}$ , $P_{iX}$ , $P_{iS}$ y $P_{iP}$
$Ea$	energía de activación
$K_s$	constante de limitación de sustrato
$K_i$	constante de inhibición de sustrato
$P_{iP}$	concentración límite de etanol para el producto
$P_{iS}$	concentración límite de etanol para el sustrato
$P_{iX}$	concentración límite de etanol para el biomasa
$P_{max}$	concentración máxima de etanol
$q_p$	tasa específica de producción de etanol
$q'_p$	pseudo-tasa específica de producción de etanol
$q_s$	tasa específica de consumo de sustrato
$q'_s$	pseudo-tasa específica de consumo de sustrato
$R$	constante universal de los gases
$S_g$	concentración de glucosa
$S_x$	concentración de xilosa
$T$	temperatura
<i>Símbolos griegos</i>	
$\alpha$	factor de peso para el consumo de glucosa
$\mu$	tasa específica de crecimiento
$\mu'$	pseudo-tasa específica de crecimiento
$\mu_{max}$	tasa máxima específica de crecimiento

## Referencias

- Bot, A.J., Nachtergaele, F.O. y Young, A. (2008). Land Resource Potential and Constraints at Regional and Country Levels. Rome, IT, Land and Water Development Division, FAO. *World Soil Resources Report 90*.
- Escamilla, M. E., De la Torre, M. y Ciurlizza, A. (1997). Aplicación del modelo de Gompertz para el estudio cinético de crecimiento del hongo *Gibberella fujikuroi* en cultivo sumergido. *Trabajo presentado en el VII Congreso Nacional de Biotecnología y Bioingeniería. II Simposio Internacional sobre Ingeniería de Bioprocesos*. Mazatlán 1997. México. pp 21-23.
- Krishnan, M. S., Ho, N. Y. y Tsao, G. T. (1999). Fermentation kinetics of ethanol production

- from glucose and xylose by recombinant *Saccharomyces 1400(pLNH33)*. Laboratory of Renewable Resources Engineering, Purdue University, West Lafayette, IN 47907, vol 77-79, 373-378.
- Leksawasdi, N., Joachimsthal, E. L. y Rogers P. L. (2001). Mathematical modelling of ethanol production from glucose/xylose mixtures by recombinant *Zymomonas mobilis*. Department of Biotechnology, University of New South Wales, Sydney, NSW 2052, Australia, 1087-1093.
- Meintjes, M. M. (2011). Fermentation coupled with pervaporation: a kinetic study. School of Chemical and Minerals Engineering of the North-West University, Potchefstroom, South Africa, pp. 20-23.
- Red Mexicana de Bioenergía (2005). *Libro Blanco de la Bioenergía En México*, México.
- Reyes, J. N. (2010). Simulación del proceso de producción de bioetanol a partir de la mezcla glucosa/xilosa con *Zymomonas mobilis*, incluyendo los efectos de temperatura y pH. *Tesis de Maestría*, Instituto Tecnológico de Celaya, Depto. de Ingeniería Química.
- Rogers, P. y Joachimsthal, E. (2000). Characterization of a high-productivity recombinant strain of *Zymomonas mobilis* for ethanol production from glucose/xylose mixtures. *Applied Biochemistry and Biotechnology* 84-86, 343-356.
- Secretaría de Energía (SENER). (2006). *Balance Nacional de Energía*, Primera edición, México D.F.
- Zhang, M., Eddy, C., Deanda, K., Finkelstein, M., y Picataggio, S. (1995). Metabolic Engineering of a Pentose Metabolism Pathway in Ethanologenic *Zymomonas mobilis*. *Science*, 240-243.