REVISTA DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA



Vol. 02 Nro. 03 | 2021

Una Simulación de la cinética de fermentación etanólica tipo lote alimentado utilizando el método Runge Kutta

Simulation of fed batch ethanol fermentation kinetics using the Runge Kutta method

Simulação da cinética de fermentação etanolina de lote alimentado usando o Método Runge Kutta

https:// doi . org/10.47422/ac.v2i3.40

Todos lo derechos reservados por el grupo Alpha Centauri Revista Internacional Artículos Científicos Originales

1



ISSN: 2709-4502 Articulo Original

Volumen 2, Número 3, Julio-Setiembre 2021

Recibido: 28/06/2021, Aceptado: 07/07/2021

Open Access

Simulación de la cinética de fermentación etanólica tipo lote alimentado utilizando el método Runge Kutta

Simulation of fed batch ethanol fermentation kinetics using the Runge Kutta method

Simulação da cinética de fermentação etanolina de lote alimentado usando o Método Runge Kutta

 GUERRERO ESCOBEDO, Adolfo Enrique Universidad Nacional de Trujillo
 MENDOZA BOBADILLA, Jorge Luis Universidad Nacional de Trujillo
 GUERRERO LLÚNCOR, Juan Adolfo Universidad Nacional de Trujillo
 VÁSQUEZ BLAS, Carlos Universidad Nacional de Trujillo
 RODRIGUEZ ESPINOZA, Ronald Fernando Universidad Nacional José Faustino Sánchez Carrión

RESUMEN

Los procesos de fermentación etanólica a nivel industrial más difundidos son los del tipo lote alimentado. El objetivo del presente trabajo, es simular este proceso y determinar los resultados finales o valores máximos de las variables más importantes. Se establecen como base los parámetros cinéticos biológicos de las referencias para Saccharomyces cerevisiae. La metodología empleada para deducir los modelos matemáticos son los balances globales de masa, de consumo de sustrato, de producción de etanol, de crecimiento de las levaduras y el de energía. Los modelamientos requieren la utilización de diferenciales ordinarias cuya resolución analítica es compleja; por ello, se propone el método númerico de Runge Kutta de cuarto orden, el cual se puede llevar a cabo en una hoja de cálculo o en el software Polymath. Según los datos ingresados a las ecuaciones, las concentraciones finales fueron de 74,06 g/L, 30,93 g/L, -0,02 g/L para etanol, levadura y sustrato respectivamente y la temperatura máxima alcanzada fue de 34,41 °C.

Palabras clave: cinética, fermentación, ecuación diferencial, modelo.





ABSTRACT

The most widespread industrial ethanolic fermentation processes are those of the fed batch type. The objective of this work is to simulate this process and determine the final results or maximum values of the most important variables. The biological kinetic parameters of the references for Saccharomyces cerevisiae are established as a basis. The methodology used to deduce the mathematical models are the global balances of mass, substrate consumption, ethanol production, yeast growth and energy. The modeling requires the use of ordinary differentials whose analytical resolution is complex; For this reason, the Runge Kutta numerical method of fourth order is proposed, which can be carried out in a spreadsheet or in Polymath software. According to the data entered into the equations, the final concentrations were 74.06 g / L, 30.93 g / L, -0.02 g / L for ethanol, yeast and substrate respectively and the maximum temperature reached was $34.41 \degree$ C.

Keywords: kinetics, fermentation, differential equation, model.

RESUMO

Os processos de fermentação industrial de etanol mais comuns são os do tipo de lote alimentado. O objectivo do presente trabalho é simular este processo e determinar os resultados finais ou os valores máximos das variáveis mais importantes. Os parâmetros cinéticos biológicos das referências para Saccharomyces cerevisiae são estabelecidos como base. A metodologia utilizada para derivar os modelos matemáticos são os balanços globais de massa, consumo de substrato, produção de etanol, crescimento de levedura e energia. A modelação requer a utilização de diferenciais comuns cuja resolução analítica é complexa; por conseguinte, propõe-se o método numérico Runge Kutta de quarta ordem, que pode ser realizado numa folha de cálculo ou no software Polymath. De acordo com os dados introduzidos nas equações, as concentrações finais foram 74,06 g/L, 30,93 g/L, -0,02 g/L para etanol, levedura e substrato respectivamente e a temperatura máxima atingida foi de 34,41 °C.

Palavras-chave: cinética, fermentação, equação diferencial, modelo.





INTRODUCCIÓN

En la actualidad, los procesos fermentativos requieren aun de investigación para maximizar la producción de etanol, obtener levaduras Saccharomyces cerevisiae de alto rendimiento y reducir los impactos ambientales. En este sentido, conocer y comprender la cinética de los fenómenos que ocurren durante la fermentación son de vital importancia para un mejor manejo a escala industrial. De esta forma, contar con modelos cinéticos y con la capacidad de simular diversas condiciones, constituyen ventajas que se pueden aprovechar y es precisamente lo que se plantea en este manuscrito.

Convencionalmente, las destilerías utilizan las mieles o melazas procedentes del proceso de producción de azúcar; en cambio las que son autónomas, mayormente, fermentan jugo de caña de azúcar o mezclas con melaza según sus requerimientos (Lopes et al., 2016).

Existen desafíos por investigar y resolver para mejorar los procesos de fermentación alcohólica. En la industria del procesamiento de la caña de azúcar, las fermentaciones alcanzan un rango de graduación alcohólica de 7 – 8% en los mostos. Esta situación genera que en la destilación se genere el efluente vinaza, en una relación de 15 – 16 L/L etanol producido. Esta alta generación contiene una elevada demanda bioquímica de oxígeno y puede constituir un problema si es que la industria no cuenta con un sistema de disposición o tratamiento eficaz. En tal sentido, aún a la actualidad, se buscan las condiciones adecuadas donde la levadura pueda procesar mostos con altas concentraciones de azúcares reductores o sólidos (25 - 30% w/v o más) a fin de obtener mayor porcentaje alcohólico (12 - 14% v/v o más), con menor producción de efluentes, sin sacrificar el rendimiento del proceso (Arshad et al., 2017).

Puligundla et al. (2019) revisó aspectos importantes de las fermentaciones de alta gravedad, las cuales permiten obtener mostos con mayores graduaciones alcohólicas. Otro tipo de mejora a la fermentación, denominado stripping, es la disminución de etanol y agua del medio por inyección de dióxido de carbono. El ahorro de agua y la reducción de la generación de efluentes es una tarea ardua que se puede lograr con las cepas de levadura adecuadas o modificación del proceso; sin embargo, éste debe ser fácil de llevar a cabo en la práctica (Rodrigues et al., 2018).

La fermentación llevada a cabo por lotes y alimentada, ha ganado importancia debido a su impacto benéfico en la economía y productividad de este bioproceso (Mohd Zain et al., 2018). Lopes et al. (2016) evaluó las ventajas y desventajas de los procesos fermentativos etanólicos conducidos por lote alimentado o de manera continua en función de 136 referencias de Brasil, donde el 83% de las destilerías utilizan el sistema por lotes alimentado y el 17% el sistema continuo. Los mayores rendimientos se alcanzan en las fermentaciones conducidas por la primera forma mientras que de la segunda manera, hay mayor contaminación de bacterias, gasto de ácido sulfúrico y antibióticos.





El desempeño de las diversas formas de fermentación a nivel de laboratorio puede culminar en el modelamiento de la cinética de sus procesos involucrados. Los modelos se desarrollan a partir de los balances de materiales y de energía. Adicionalmente, se requieren de los parámetros cinéticos biológicos obtenidos experimentalmente en diversos estudios científicos según las condiciones de trabajo (Fonseca et al., 2017).

Rodrigues et al., (2018) utilizaron el modelo cinético Andrews – Levenspiel y desarrolló su sistema de ecuaciones con el método de Runge Kutta de cuarto grado; así mismo, Veloso et al., (2019) emplearon la misma cinética de crecimiento celular y forma de resolución para las ecuaciones diferenciales ordinarias planteadas.

En el contexto actual de la pandemia a raíz del COVID 19 la producción de etanol cobra protagonismo por su capacidad de desinfección de superficies y prevención de contagios; por tanto, ello motiva la búsqueda por mejorar sus procesos de obtención. El objetivo de esta investigación es determinar los modelos cinéticos de fermentación. apoyándose en los parámetros biológicos de la bibliografía, para obtener los porcentajes de alcohol, la concentración final de levadura y azúcar residual (sustrato), así como la temperatura máxima alcanzada en un fermentador de 400 m³. La metodología propuesta es sencilla, eficaz y se propone como punto de partida para futuras investigaciones orientadas a la innovación en esta área.

MATERIAL Y MÉTODOS

En los siguientes acápites se describen los métodos utilizados para simular un proceso de fermentación etanólica tipo lote alimentado.

Modelos cinéticos

Los modelos matemáticos del proceso de fermentación etanólica que se utilizaron para la simulación, se muestran resumidos en la Tabla 1. Resultan de los balances de materiales y también de energía; adicionalmente, es necesario un modelo que describa el comportamiento de la velocidad de crecimiento celular de la levadura Saccharomyces cerevisiae, en este caso, la ecuación (3) descrita en la tabla es una variante de la ecuación de Monod y fue desarrollada por Lee et al., (1995). Como se pueden apreciar las ecuaciones (1), (2), (6), (7), (8) y (9) son diferenciales ordinarias, cuya solución requiere un método matemático numérico. Se eligió la metodología de resolución de Runge Kutta de cuarto orden.

En el balance global no se consideraron salidas al ser un fermentador del tipo lote alimentado, la levadura o fermento espera inicialmente en el fermentador y luego es alimentado con el mosto a la concentración especificada de azúcares reductores totales o ART (sustrato). La velocidad de crecimiento celular de la levadura a expensas del sustrato se muestra en la ecuación (3) (Magazoni et al., 2009; Amillastre et al., 2012; Serebrinsky et al., 2019; Lemos et al., 2020).





La entalpía de la reacción de la fermentación se obtuvo de las entalpías de formación de las especies químicas que se representan en la siguiente ecuación química a condiciones estándares de 1 atm y 25 °C (Scheiblauer et al., 2018; Chagas et al., 2008).

 $C_6H_{12}O_6 (_{ac}) \rightarrow 2CH_3\text{-}CH_2OH (_l) + 2CO_2 (_g)$

Siendo la variación de la entalpía para esta reacción de $\Delta H_R^0 =$ -69.4 kJ/mol y las variaciones de entalpía en función de la glucosa y etanol son: 386 J/g y 754 J/g respectivamente.

Por cada 100 g de glucosa, la relación etanol/dióxido de carbono es 51,1/48,9 lo cual indica que el rendimiento teórico máximo es de 51,1 g de etanol. A causa de que la glucosa es convertida en células nuevas que almacenan carbohidratos y se producen metabolitos secundarios, el rendimiento teórico máximo no puede ser alcanzado. Adicionalmente, se generan pérdidas de azúcar por reacciones de Maillard, contaminación por bacterias y limitantes tecnológicas. Por lo menos, se debe aspirar al 90% del rendimiento teórico (Walker & Walker, 2018).

Parámetros para el proceso de fermentación por lotes alimentado

Se consideró un fermentador de volumen máximo de trabajo de 400 m³ que consta de un intercambiador de placas por donde recircula el mosto fermentado, a fin de controlar la temperatura en un valor que permita el mejor desempeño de la fermentación. En la figura 1 se muestra el esquema de un biorreactor industrial, los parámetros mencionados se especifican en la Tabla 2.

En la Tabla 2 se muestran los parámetros necesarios para simular el proceso. Los espacios en blanco hacen referencia a variables de salida o respuesta. Se está considerando diez horas de fermentación total; sin embargo, se divide en dos partes: el tiempo de alimentación y el tiempo de atenuación.

Tabla 1

Modelos cinéticos que describen el proceso de fermentación por lotes alimentado

Denominación	Balance	Modelo cinético resultante
Global	Acumulación = Entrada	$\frac{dV}{dt} = F \dots (1)$
Crecimiento celular	Acumulación = Formación	$\frac{dX}{dt} = (\mu - D) \cdot X \dots (2)$
Velocidad de crecimiento celular		$\mu = \mu_{max} \left(\frac{S}{k_s + S + \frac{S^2}{k_i}} \right) \left(1 - \frac{P}{P_{max}} \right)^n \left(1 - \frac{X}{X_{max}} \right)^m \dots (3)$





Velocidad de consumo de sustrato		$\gamma_{S} = \left(\frac{\mu}{Y_{X/S}} + M_{S}\right) . X \dots (4)$
Velocidad de producción de etanol		$\gamma_P = \left(\frac{Y_{P/S}}{Y_{X/S}}.\mu\right).X\dots(5)$
Consumo de sustrato	Acumulación = Entrada – Consumo	$\frac{dS}{dt} = D.(S_0 - S) - \left(\frac{\mu}{Y_{X/S}} + M_S\right).X(6)$
Producción de etanol	Acumulación = Formación	$\frac{dP}{dt} = \left(\frac{Y_{P/S}}{Y_{X/S}}.\mu\right).X - D.P(7)$
Calor	Acumulación = Ingreso + Evolucionado - Transferido	$\frac{d(Q)}{dt} = m.c_p.T_0 + \gamma_p.V.\Delta H_R$ $-m_c.c_p.(T - T_c) \dots (8)$
Temperatura		$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V}(T_0 - T) - \frac{F_c}{V}(T - T_c)$
		$+ \frac{\gamma_p.\Delta H_R}{\rho.c_p} \dots (9)$

Biorreactor tipo lote alimentado

Flujo de mosto F, So, To



Nota. Ver identificación de parámetros en Tabla 2.



Revista de Investigación Científica y Tecnológica Alpha Centauri Volumen 2, Número 3, Julio-Setiembre 2021

doi ISSN: 2709-4502

Es decir, la alimentación de mosto a la levadura solo ocurre por un determinado número de horas, luego la fermentación prosigue por otro intervalo hasta que cesa la producción de etanol, la cual se evidencia por la nula generación de dióxido de carbono y la estabilización de la concentración del sustrato.

Tabla 2

D	1		1		1	ſ		4	1 - 4 -		
Parametros	nara ia	simulacion	100	nracesa	ne	terment	ación	TIDO	INTP	anmeni	nn
1 010110105	paraia	Summercicion	uci	proceso	uc j	crniciti	acton	upo	ioic	autincin	uno
	1			1				1			

Símbolo	Descripción	Valor	Unidad	Referencia
F	Flujo volumétrico de alimentación	66400	L/h	
t	tiempo	10	h	
Х	Concentración de células		g/L	
Vmax	Volumen de trabajo del fermentador	400000	L	
V	Volumen de mosto en el fermentador		L	
μ	Velocidad específica de crecimiento		1/h	
D	Tasa de dilución del mosto F/V		1/h	
μmax	Velocidad específica de crecimiento máximo	0,45	1/h	(Kouamé et al., 2021; Amillastre et al., 2012)
Xmax	Concentración a la cual termina el desarrollo	147	g/L	(Alfenore et al., 2004)
Pmax	Concentración de producto cuanto cesa el crecimiento celular	90	g/L	(Fonseca et al., 2017)
ks	Concentración de saturación para el crecimiento celular	6	g/L	(Romanholi et al., 2009)
ki	Coeficiente de inhibición del sustrato	30	g/L	(Scheiblauer et al., 2018)
n	Potencia de inhibición del sustrato	1,5		(Atala et al., 2001)
m	Potencia de inhibición de la célula	1		(Atala et al., 2001)
So	Concentración inicial de sustrato	180,10	g/L	
Ms	Constante de manutención celular	0,003		
YX/S	Rendimiento en masa celular	0,035	g/g	(Fonseca et al., 2017)
γ_s	Velocidad de consumo de sustrato		g/L.h	
YP/S	Rendimiento de producto	0,445	g/g	(Fonseca et al., 2017; Andrietta, 2009; Amillastre et al., 2012; Lemos et al., 2020)
γ_n	Velocidad de producción de etanol		g/L.h	
Q	Calor		J	
m	Flujo másico de alimentación de mosto	442839,2	kg/h	
mc	Flujo másico de recirculación de vino	442839,2	kg/h	
То	Temperatura de ingreso del mosto	29,0	°C	





Тс	Temperatura de vino a la salida del intercambiador	33,0	°C
Т	Temperatura de vino al ingreso al intercambiador		°C
Tref	Temperatura de referencia	0	°C
ΔH_R	Entalpía de la reacción	754	J/g
Fc	Flujo de recirculación de mosto	400000	L/h
ρ	Densidad del mosto	1107,098	g/L
ср	Capacidad calorífica del mosto	4,121	J/g°C

Método de resolución Runge Kutta

El método más exacto y difundido para obtener soluciones aproximadas al problema de valor inicial es el de Runge Kutta de cuarto orden el cual se utilizó para resolver el sistema de ecuaciones (1), (2), (6), (7) (8) y (9) propuestos (Oviedo, 2014; Hussain et al., 2016).

El método general de Runge Kutta consiste en sustituir el problema de valor inicial (Salamanca, 2013; Sarafyan, 1994).

 $\frac{dy}{dx} = f(x, y) \dots (10)$

$$y(x_o) = y_o$$

Tabla 3

Cuadro resumen de métodos de resolución Runge Kutta

Método de Método de Estimación de Runge Kutta Resolución de la Resultados $y_{n+1}, y_{n+1/2}$ Integral $k_1 = f(x_n, y_n)$ Segundo $k_2 = f(x_{n+1}, y_n + h.k_1)$ \overline{y}_{n+1} : Euler Trapecio Orden $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$ $k_1 = f(x_n, y_n)$ \overline{y}_{n+1} : Euler Tercer Orden Simpson $k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h.k_1}{2})$ $\overline{y}_{n+1/2}$: Euler



Revista de Investigación Científica y Tecnológica Alpha Centauri Volumen 2, Número 3, Julio-Setiembre 2021



Por el equivalente:

$$dy = \int_{x_0}^{x} f(x, y(x)) dx \Longrightarrow y$$

= y_0
+ $\int_{x_0}^{x} f(x, y(x)) dx \dots (11)$

Planteando el problema paso a paso tenemos:(Sarafyan, 1994)

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \dots (12)$$

La Tabla 3 describe un resumen de los métodos de Runge Kutta desde el segundo hasta el cuarto orden.

$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3)$ $k_1 = f(x_n, y_n)$ $k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h \cdot k_1}{2})$ Similar a tercer orden con $h = h \cdot k_2$	Cuarto Orden Simpson $y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3)$ $k_1 = f(x_n, y_n)$ $k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h \cdot k_1}{2})$ $k_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h \cdot k_2}{2})$			$k_3 = f(x_n + h, y_n - k_1 + 2h.k_2)$
$k_1 = f(x_n, y_n)$ $k_2 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h.k_1}{2})$ Similar a tercer orden con $h = h k_n$	Cuarto Orden Simpson $k_{1} = f(x_{n}, y_{n})$ $k_{2} = f(x_{n} + \frac{h}{2}, y_{n} + \frac{h.k_{1}}{2})$ $k_{3} = f(x_{n} + \frac{h}{2}, y_{n} + \frac{h.k_{2}}{2})$ $k_{3} = f(x_{n} + \frac{h}{2}, y_{n} + \frac{h.k_{2}}{2})$			$y_{n+1} = y_n + \frac{\pi}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3)$
$k_2 = f(x_n + \frac{1}{2}, y_n + \frac{1}{2})$ Similar a tercer orden con h	Cuarto Orden Simpson $ \begin{array}{l} \text{Similar a tercer orden con} \\ \text{adición de paso intermedio} \end{array} $ $ \begin{array}{l} \text{K}_2 = f(x_n + \frac{1}{2}, y_n + \frac{1}{2}) \\ \text{K}_3 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h.k_2}{2}) \\ \text{K}_4 = f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h.k_2}{2}) \\ \text{K}_5 = f(x_n + h$			$\mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)$
	Cuarto Orden Simpson adición de paso intermedio $k_3 = f(x_n + \frac{\pi}{2}, y_n + \frac{\pi k_2}{2})$		Similar a tercer orden con	$k_2 = f(x_n + \frac{1}{2}, y_n + \frac{1}{2})$
$k_4 = f(x_n + h, y_n + h.k_3)$				$y_{n+1} = y_n + \frac{\pi}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$

El método de Runge Kutta de cuarto orden fácilmente se pudo utilizar en una hoja de cálculo a fin de visualizar con mayor facilidad, las soluciones, mediante los gráficos de las cinéticas respectivas. Sreemahadevan et al. (2018) resolvió los modelamientos matemáticos con Matlab R2014b a través de la rutina ODE45. Comparó los resultados de sus modelos con los experimentales y utiliza la prueba estadística "t" para evaluar la significancia de los datos obtenidos en el laboratorio. Para el caso de esta investigación se utilizó una hoja de cálculo y el software Polymath para efecto de comparación.

Se consideraron para la simulación, como valores iniciales, los que se muestran en la Tabla 4. En las observaciones, se da una explicación adicional que sustenta a estos datos de partida.

Tabla 4

Variable	Símbolo	Valor inicial	Unidad	Observaciones
Volumen inicial	V(0)	68000	L	Este volumen es ocupado por la levadura antes de alimentar el mosto al fermentador.
Concentración inicial de las levaduras	X(0)	143,69	g/L	Indica la concentración de las levaduras en los 68000 L después de un tratamiento con ácido y agua.
Concentración inicial de sustrato en el volumen inicial de levaduras	S(0)	0	g/L	En los 68000 L aún no hay sustrato (azúcares reductores totales). El mosto se alimenta después de cargar la levadura al fermentador de acuerdo al proceso tipo lote alimentado.
Concentración inicial de etanol en la levadura	P(0)	48,8	g/L	Al terminar la fermentación, la levadura es recuperada por centrifugación y pasa a la etapa de tratamiento. Al iniciar cada nuevo ciclo de fermentación ya tiene una concentración de etanol.
Temperatura inicial en el fermentador	T(0)	31,5	°C	Corresponde a la temperatura de la levadura al término de su trasvase al fermentador



Tiempo de inicio de la fermentación	t(0)	0	h	Corresponde al tiempo de inicio de la fermentación
Tiempo final de la fermentación	t(f)	10	h	Tiempo que dura el procesamiento del lote de fermentación.

RESULTADOS

La Figura 2 muestra la evolución del consumo de sustrato, producción de etanol, crecimiento de la levadura en función del tiempo. Las figuras 3 y 4 muestran la evolución de la temperatura y calor en función del tiempo, respectivamente. Las tres figuras fueron desarrolladas con la resolución de Kunge Rutta en hoja de cálculo

Figura 2

Modelos cinéticos resueltos con Runge Kutta Cuarto Orden – Cinética de consumo de sustrato (Azúcares reductores totales – ART), cinética de formación de producto (etanol) y cinética de concentración de levadura en función del tiempo.







Evolución de temperatura en el fermentador resuelto con el método de Runge Kutta cuarto orden



Figura 4

Evolución de calor removido en el fermentador resuelto con el método de Runge Kutta cuarto orden



Las figuras 5, 6, 7 muestran resultados similares desarrollados en el software Polymath y en la

Tabla 4 se muestra un reporte generado con todas las ecuaciones y datos ingresados.







Modelos cinéticos resueltos con software Polymath, método Runge Kutta de cuarto orden

Figura 6

Perfil de temperaturas con software Polymath según el método Runge Kutta de cuarto orden







Perfil del calor removido con software Polymath según el método Runge Kutta de cuarto orden



Tabla 4

Reporte generado por Polymath

Característica	Variable	Valor	Ecuación Polymath
Ecuaciones			
Explícitas	So	180,1	So=180,10
	Vmax	400000	Vmax=400000
	tmax	5	tmax=5,0
	F	66400	F=If (t >= tmax) Then 0 Else (Vmax - 68000) / tmax
	D	0,98	D=F / V
	u	0	u=umax * (S / (S + Ks + (S ^ 2 / Ki))) * ((1 - P / Pmax) ^ n) * ((1 - X / Xmax) ^ m)
	rs	0,43	rs=(u/Yxs + Ms) * X
	rp	0	rp=(Yps/Yxs) * u * X
	Yxs	0,035	Yxs=0,035
	Yps	0,445	Yps=0,445
	umax	0,45	umax=0,45
	ks	6	Ks=6
	ki	30	Ki=30
	Ms	0,003	Ms=0,003
	Xmax	147	Xmax=147
	n	1,5	n=1,5
	m	1	m=1
	Pmax	90	Pmax=90
	Qr	FALSO	Qr=If (T <= Tc) Then Fc == 0 Else Fc * d * Cp * (T - Tc)





	То	29	To=29
	Tc	33	Tc=33
	Нр	754	Hp=754
	d	1107,098	d=1107,098
	Ср	4,121	Cp=4,121
	Fc	400000	Fc=400000
Variables de			
Integración	V	68000	V(0)=68000
	Х	143,69	X(0)=143,69
	S	0	S(0)=0
	Р	48,8	P(0)=48,8
	Q	0	Q(0)=0
	Т	31,5	T(0)=31,5
EDO	d(V)/d(t)	66400	d(V)/d(t) = F
	d(X)/d(t)	-140,309	d(X)/d(t) = (u - D) * X
	d(S)/d(t)	175,43	d(S)/d(t) = D * (Sa - S) - rs
	d(P)/d(t)	-47,65	d(P)/d(t) = rp - D * P
	d(Q)/d(t)	8,79E+09	d(Q)/d(t) = F * d * Cp * (To) + rp * V * Hp - Qr
			d(T)/d(t) = D * (To - T) + rp * (Hp / (d * Cp)) - (Fc / (fr + Cp))) + (Fc / (fr + Cp
	d(T)/d(t)	6,38	V) * (T - Tc)
Variable Ind.	t	0	t(0)=0; t(f)=10

Nota. EDO: ecuaciones diferenciales ordinarias, Ind.: Independiente, Qr: Calor de reacción

En la Tabla 5 se muestran los resultados principales obtenidos en la hoja de cálculo y el software polymath, notando que las diferencias son mínimas puesto que ambas resuelven los sistemas de ecuaciones con el mismo método numérico Runge Kutta.

Tabla 5

Resultados comparativos en hoja de cálculo y software Polymath

Variable	Hoja de Cálculo	Polymath	Diferencia
Concentración final de etanol (g/L)	74,06	74,46	0,40
Concentración final de levaduras (g/L)	30,93	29,63	1,30
Concentración final de sustrato (g/L)	-0,02	-0,02	0
Temperatura máxima (°C)	34,41	34,38	0,03





DISCUSIÓN

Resolución del sistema de ecuaciones diferenciales mediante hoja de cálculo

En la Figura 2 se observan la cinética de consumo, producción y crecimiento; a nivel industrial, es primordial determinar las condiciones y momentos en que se logrará la máxima concentración de etanol, de modo que con los parámetros adecuados se puede simular la fermentación y obtener data valiosa que nos permita sugerir y ejecutar mejoras. Así mismo, se aprecia que al cabo de cinco horas se produce una inflexión en las tres curvas debido a que en este punto del tiempo se cierra la alimentación al fermentador. De tal forma que los azúcares reductores terminan de consumirse después de 7,5 horas y se logra la máxima concentración de etanol de 74,16 g/L. La concentración de la levadura disminuye conforme se va alimentando mosto para estabilizarse a las 6,9 horas en 30,93 g/L; no se observa ningún ascenso en su curva que nos indique una propagación excesiva del microorganismo, corroborando el hecho que se trata de un proceso anaeróbico. El sistema de ecuaciones diferenciales se resolvió utilizando una hoja de cálculo y el método Runge Kutta de cuarto orden. El desempeño de la producción de etanol es similar a los trabajos realizados por Mesa et al., (2020) y Mohd Zain et al., (2018). De la misma forma hay similitudes con respecto al consumo de sustrato en las investigaciones de Badino et al., (2020). En la Figura 3, se observa el perfil de temperaturas en función del tiempo, siendo que la temperatura

máxima alcanzada en el fermentador al cabo de 5,6 horas es de 34,41°C, dato significativo a nivel industrial para ajustar el flujo del agua de enfriamiento o considerar la revisión del diseño del intercambiador de calor respectivo. Si se desea modificar la temperatura máxima en la simulación, se debe cambiar el flujo de recirculación (Fc) y/o la temperatura de ingreso del mosto de alimentación (To). Andrietta (2009) ha reportado curvas similares a las Figuras 2, 3 y 4 que, para efectos de este trabajo, se han desarrollado en una hoja de cálculo; de la misma forma, Magazoni et al., (2009) grafica tendencias parecidas, incluso la evolución de la temperatura en función del tiempo, para un fermentador del tipo lote alimentado con sistema de enfriamiento.

Resolución del sistema de ecuaciones diferenciales mediante software Polymath

Las figuras 5, 6 y 7 son las gráficas resultantes de resolver el sistema de ecuaciones utilizando el software Polymath con la rutina de Runge Kutta de cuarto orden; se observan los mismos comportamientos que las figuras 2, 3y 4 desarrolladas en hoja de cálculo. La tabla 4 muestra el reporte generado por el software Polymath con todas las ecuaciones y parámetros que se deben especificar línea a línea, sin ningún tipo de signo de puntuación separador. La simbología es la misma que se presenta en las Tabla 2. El módulo utilizado se denomina Ecuaciones diferenciales y la rutina correspondiente para la solución fue RKF45 (Runge Kutta de cuarto orden).





CONCLUSIONES

Runge Kutta es un método sencillo y adecuado para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias complejas que describen el comportamiento de la fermentación tipo lote alimentado. Los resultados obtenidos en hoja de cálculo y en el software polymath son muy similares. Tomando en consideración al primero, las concentraciones finales de etanol, levaduras y azúcares residuales fueron de 74,06 g/L, 30,93 g/L y -0,02 g/L respectivamente; la temperatura máxima alcanzada en el fermentador, al cabo de 5,6 horas, fue de 34,41°C. La metodología empleada permite simular condiciones de este proceso fermentativo para cualquier industria y, por lo tanto, ayuda a la consecución de la mejora continua. Los desafíos científicos y tecnológicos continúan hasta el día de hoy; estudios experimentales con nuevas cepas de levadura Saccharomyces cerevisiae se pueden realizar juntamente con nuevos procesos, citando como ejemplos las fermentaciones de alta gravedad y stripping, cuyos modelamientos cinéticos serán necesarios y se podrán efectuar bajo los procedimientos propuestos en el presente trabajo de investigación.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alfenore, S., Cameleyre, X., Benbadis, L., Bideaux,C., Uribelarrea, J. L., Goma, G., Molina-Jouve, C., & Guillouet, S. E. (2004). Aeration

strategy: A need for very high ethanol performance in Saccharomyces cerevisiae fed-batch process. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 63(5), 537–542. https://doi.org/10.1007/s00253-003-1393-5

- Amillastre, E., Aceves-Lara, C. A., Uribelarrea, J.
 L., Alfenore, S., & Guillouet, S. E. (2012).
 Dynamic model of temperature impact on cell viability and major product formation during fed-batch and continuous ethanolic fermentation in Saccharomyces cerevisiae. *Bioresource Technology*, *117*, 242–250.
 https://doi.org/10.1016/j.biortech.2012.04.01 3
- Andrietta, S. R. (2009). Optimal Industrial Fermentation. In BIOEN –Workshop on Process for Ethanol Production -FAPESP. http://www.fapesp.br/eventos/2009/09/10_bi oen/Silvio Roberto.pdf
- Arshad, M., Hussain, T., Iqbal, M., & Abbas, M. (2017). Enhanced ethanol production at commercial scale from molasses using high gravity technology by mutant S. cerevisiae. *Brazilian Journal of Microbiology*, 48(3), 403–409.

https://doi.org/10.1016/j.bjm.2017.02.003

Atala, D. I. P., Costa, A., Maciel Filho, R., & Maugeri, F. (2001). Kinetics of Ethanol Fermentation with High Biomass Concentration. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 91, 353–361. https://doi.org/10.1385/ABAB:91-93:1-9:353

Badino, A. C., Veloso, I. I. K., Rodrigues, K. C. S.,





Ribeiro, M. P. A., & Cruz, A. J. G. (2020). Temperature influence in real-time monitoring of fed-batch ethanol fermentation by mid-infrared spectroscopy. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 59(41), 18425–18433.

https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c03717

- Chagas, N. V., Rosa, M. R. da, Reis, A. H. dos, Torres, Y. R., Santos, J. M. T. dos, & Rigo, M. (2008). Estudo de Cinética de Fermentação Alcoólica por Células de Saccharomyces Cerevisiae em Mel Diluído A Study of Alcoholic Fermentation Kinetics by. *Revista Ciências Exatas e Naturais, 10*, 10.
- Fonseca, G. C., Costa, C. B. B., & Cruz, A. J. G. (2017). Comparing a dynamic fed-batch and a continuous steady-state simulation of ethanol fermentation in a distillery to a stoichiometric conversion simulation. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 34(4), 1121–1131. https://doi.org/10.1590/0104-6632.20170344s20160155
- Hussain, K., Ismail, F., & Senu, N. (2016). Solving directly special fourth-order ordinary differential equations using Runge-Kutta type method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, *306*, 179–199. https://doi.org/10.1016/j.cam.2016.04.002
- Kouamé, C., Loiseau, G., Grabulos, J., Boulanger,
 R., & Mestres, C. (2021). Development of a model for the alcoholic fermentation of cocoa beans by a Saccharomyces cerevisiae strain. *International Journal of Food Microbiology*,

337, 108917. https://doi.org/10.1016/j.ijfoodmicro.2020.1 08917

- Lee, Y. S., Lee, W. G., Chang, Y. K., & Chang, H.
 N. (1995). Modelling of ethanol production by Saccharomyces cerevisiae from a glucose and maltose mixture. *Biotechnology Letters*, *17*(8), 791–796. https://doi.org/10.1007/BF00129006
- Lemos, D. A., Sonego, J. L. S., Cruz, A. J. G., & Badino, A. C. (2020). Improvement of ethanol production by extractive fed-batch fermentation in a drop column bioreactor. *Bioprocess and Biosystems Engineering*, 43(12), 2295–2303. https://doi.org/10.1007/s00449-020-02414-5
- Lopes, M. L., Paulillo, S. C. de L., Godoy, A., Cherubin, R. A., Lorenzi, M. S., Giometti, F. H. C., Bernardino, C. D., de Amorim Neto, H. B., & de Amorim, H. V. (2016). Ethanol production in Brazil: a bridge between science and industry. *Brazilian Journal of Microbiology*, 47, 64–76. https://doi.org/10.1016/j.bjm.2016.10.003
- Magazoni, F. C., Monteiro, J. B., Deucher, R., Da Costa Filho, M. V. A., Cardemil, J. M., & Colle, S. (2009). Cooling of ethanol fermentation process using absorption chillers. ECOS 2009 - 22nd International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems, 1465–1476. https://doi.org/10.5541/ijot.167



ISSN: 2709-4502

- Mesa, L., Martínez, Y., Celia de Armas, A., & González, E. (2020). Ethanol production from sugarcane straw using different configurations of fermentation and technoeconomical evaluation of the best schemes. *Renewable Energy*, 156, 377–388. https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.04.091
- Mohd Zain, M. Z. bin, Kanesan, J., Kendall, G., & Chuah, J. H. (2018). Optimization of fedbatch fermentation processes using the Backtracking Search Algorithm. *Expert Systems with Applications*, *91*, 286–297. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2017.07.034
- Oviedo, J. M. (2014). Sistemas de Ecuaciones Diferenciales-Resolución por medio de Maple, Matemática, Gauss, Matlab y Macros en Excel.
- Puligundla, P., Smogrovicova, D., Mok, C., & Obulam, V. S. R. (2019). A review of recent advances in high gravity ethanol fermentation. *Renewable Energy*, 1366– 1379.

https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.06.062

Rodrigues, K. C. S., Sonego, J. L. S., Cruz, A. J. G., Bernardo, A., & Badino, A. C. (2018).
Modeling and simulation of continuous extractive fermentation with CO2 stripping for bioethanol production. *Chemical Engineering Research and Design*, 132, 77– 88.

https://doi.org/10.1016/j.cherd.2017.12.024

Romanholi, T. M., Badino, A. C., & Moura, L. F. De. (2009). MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA GERAÇÃO AUTÓGENA DE PRESSÃO EM DORNAS DE FERMENTAÇÃO ALCOÓLICA. VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química Em Iniciação Científica.

- Salamanca, U. de. (2013). *Métodos Numéricos en Ecuaciones Diferenciales Ordinarias*. Universidad de Salamanca. http://campus.usal.es/~mpg/Personales/Perso nalMAGL/Docencia/MetNumTema4Teo(09-10).pdf
- Sarafyan, D. (1994). Approximate solution of ordinary differential equations and their systems through discrete and continuous embedded Runge-Kutta formulae and upgrading of their order. *Computers and Mathematics with Applications*, 28(10–12), 353–384. https://doi.org/10.1016/0898-1221(94)00201-0
- Scheiblauer, J., Scheiner, S., Joksch, M., & Kavsek,
 B. (2018). Fermentation of Saccharomyces cerevisiae Combining kinetic modeling and optimization techniques points out avenues to effective process design. *Journal of Theoretical Biology*, 453, 125–135. https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2018.05.016
- Serebrinsky, K., Hirmas, B., Munizaga, J., & Pedreros, F. (2019). 2019 IEEE CHILEAN Conference on Electrical, Electronics Engineering, Information and Communication Technologies (CHILECON). IEEE.
- Sreemahadevan, S., Singh, V., Roychoudhury, P. K., & Ahammad, S. Z. (2018). Mathematical modeling, simulation and validation for co-





fermentation of glucose and xylose by Saccharomyces cerevisiae and Scheffersomyces stipitis. *Biomass and Bioenergy*, *110*(October 2017), 17–24. https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2018.01.0 08

- Veloso, I. I. K., Rodrigues, K. C. S., Sonego, J. L.
 S., Cruz, A. J. G., & Badino, A. C. (2019).
 Fed-batch ethanol fermentation at low temperature as a way to obtain highly concentrated alcoholic wines: Modeling and optimization. *Biochemical Engineering Journal*, 141, 60–70. https://doi.org/10.1016/j.bej.2018.10.005
- Walker, G. M., & Walker, R. S. K. (2018).
 Enhancing Yeast Alcoholic Fermentations. In *Advances in Applied Microbiology* (Vol. 105).
 Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/bs.aambs.2018.05.00 3

CORRESPONDENCIA:

Adolfo Enrique Guerrero Escobedo aguerreroe@unitru.edu.pe



