

SEGURIDAD EN LA INDUSTRIA DE LA FERMENTACIÓN ABE: ESTUDIO DE PUNTOS DE INFLAMACIÓN Y MODELOS TERMODINÁMICOS

SAFETY IN THE ABE FERMENTATION INDUSTRY: STUDY OF FLASH POINTS AND THERMODYNAMIC MODELS

Jennifer L. Pérez-Vicente, Cristian Ricárdez-García, Antioco López-Molina*, Carolina Conde-Mejía, Luis M. Valenzuela-Gómez

División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco,
Carr. Libre Villahermosa-Comalcalco km. 27, Tabasco – México
(correo de contacto: antioco.lopez@ujat.mx)

Recibido: 06/08/2022 - Evaluado: 26/08/2022 - Aceptado: 22/09/2022

RESUMEN

La fermentación ABE (Acetona-Butanol-Etanol) es relevante en la industria e investigación por su capacidad de producir solventes y productos químicos valiosos. Evaluar su peligrosidad es crítico debido a la producción de solventes inflamables y volátiles, lo que conlleva riesgos de incendios y exposición. Este estudio analiza el cambio en la peligrosidad de la mezcla ABE en solución acuosa. Se evaluaron los puntos de inflamación en concentraciones que varían del 100% v/v al 1.5% v/v para acetona + agua, butanol + agua, etanol + agua y ABE + agua. Se utilizaron equipos especializados de copa cerrada Pensky-Martens (modelo SYP1002B-IV) y un recirculador para el control de temperatura. Los resultados experimentales se compararon con cuatro modelos termodinámicos (NRTL, UNIFAC, UNIQUAC y Wilson). La ecuación de Antoine se usó para medir la presión de vapor y se aplicó una versión modificada de la ecuación de Le Chatelier para estimar los puntos de inflamabilidad. Se encontró que la mezcla ABE sigue siendo inflamable a concentraciones de 3.7% v/v, cambiando su nivel de peligrosidad de altamente inflamable a fácilmente inflamable. Sin embargo, las predicciones de los modelos termodinámicos presentaron desviaciones de hasta 6.6% de error a concentraciones bajas de las mezclas analizadas. Esto resalta la importancia de una evaluación detallada de riesgos en la fermentación ABE y en las secuencias de separación de productos para evitar posibles escenarios de incendio en el manejo, almacenamiento y transporte de productos.

ABSTRACT

ABE (Acetone-Butanol-Ethanol) fermentation is relevant in industry and research due to its ability to produce valuable solvents and chemicals. Assessing its hazard is critical due to the production of flammable and volatile solvents, which carry fire risks and exposure. This study analyzes the change in the hazard of the ABE mixture in aqueous solution. Flashpoints were evaluated at concentrations ranging from 100% v/v to 1.5% v/v for acetone + water, butanol + water, ethanol + water, and ABE + water. Specialized Pensky-Martens closed cup equipment (model SYP1002B-IV), and a recirculator were used for temperature control. The experimental results were compared with four thermodynamic models (NRTL, UNIFAC, UNIQUAC, and Wilson). Antoine's equation was used to measure vapor pressure, and a modified version of Le Chatelier's equation was applied to estimate flash points. It was found that the ABE mixture remains flammable at concentrations of 3.7% v/v, changing its hazard level from highly flammable to easily flammable. However, the predictions of the thermodynamic models presented deviations of up to 6.6% error at low concentrations of the analyzed mixtures. This highlights the importance of detailed risk assessment in ABE fermentation and product separation sequences to avoid potential fire scenarios in product handling, storage, and transportation.

Palabras clave: Punto de Inflamación, coeficiente de actividad, copa cerrada, bioprocesos
Keywords: Flash Point, activity coefficient, closed Cup, bioprocesses

INTRODUCCIÓN

La búsqueda de procesos rentables para la producción de biocombustibles es una constante en el mundo. Hasta ahora, la biomasa y, en particular, los desechos de biomasa son la alternativa más limpia y sostenible debido a que no compiten con la alimentación, son abundantes y tienen un bajo impacto ambiental (Silpa *et al.*, 2018; Dessie *et al.*, 2020). Uno de los procesos de interés es la producción de butanol por medio de la fermentación acetona, butanol y etanol (ABE). Este proceso, aunque no es de reciente creación, ya que fue desarrollado por Chaim Wieizmann en 1916 para la producción de acetona, etanol y butanol a partir de almidón (Daroch *et al.*, 2017), ha vuelto a ser relevante en la actualidad gracias a varias razones. En primer lugar, el butanol producido a través de la fermentación ABE es un biocombustible prometedor que puede reemplazar al butanol derivado del petróleo. Esto es especialmente importante en un momento en que los precios del petróleo fluctúan y hay una creciente preocupación por la crisis energética global y las regulaciones ambientales más estrictas. Además, la fermentación ABE tiene la ventaja de utilizar microorganismos de la familia *Clostridia*, que son capaces de fermentar una amplia gama de sustratos, incluyendo biomasa lignocelulósica y subproductos agrícolas (Jin *et al.*, 2019). Esto significa que la fermentación ABE puede aprovechar fuentes de carbono abundantes y de bajo costo, lo que la hace económicamente atractiva (Li *et al.*, 2019; Veza *et al.*, 2021). Sin embargo, quedan retos pendientes en el proceso de fermentación ABE, uno de ellos es la baja concentración de los productos obtenidos, especialmente de biobutanol. Aunque la proporción de los productos ABE es de 3:6:1, la concentración de los productos es típicamente baja (Abdehagh *et al.*, 2014).

La seguridad en los procesos industriales es un aspecto crítico y debe ser abordado de manera adecuada. Martínez-Gómez *et al.* (2016), analizaron la purificación de la mezcla ABE utilizando el método cuantitativo de análisis de riesgos (QRA), así como HAZOP para identificar los incidentes potenciales asociados con los sistemas de separación. Además, usaron un modelo de probabilidad de vulnerabilidad Probit para evaluar el daño físico causado al personal. Sin embargo, se consideró que las corrientes transportan únicamente la mezcla de las sustancias inflamables, despreciando el efecto de la presencia de agua, lo cual no es del todo correcto. Se ha demostrado que las disoluciones acuosas de sustancias inflamables continúan siendo peligrosas, esto a través de la medición del punto de inflamabilidad (FP) (Astbury *et al.*, 2004; Liaw *et al.*, 2008; Lakzian *et al.*, 2020), el cual se define como la temperatura mínima a la cual un líquido inflamable desprende suficiente vapor para formar una mezcla inflamable con el aire. Varios trabajos proponen mejoras en la predicción del punto de inflamabilidad para mezclas de sustancias puras (Haghtalab *et al.*, 2016; Costa do Nascimento *et al.*, 2021; Lakzian *et al.*, 2021; Huo *et al.*, 2022; Vilas-Boas *et al.*, 2023).

El cálculo convencional del punto de inflamabilidad es con modelos basados en la presión de vapor, formulados bajo la regla de Le Chatelier, los cuales son más confiables en comparación con otros modelos de predicción. Estos modelos tienen una mayor eficiencia de predicción para mezclas no ideales, aunque su precisión depende en gran medida de la exactitud de los modelos de coeficiente de actividad utilizados. Phoon *et al.* (2014), presentan una amplia revisión sobre los modelos para predecir esta propiedad, dejando claro que no existe un modelo universal para predecir el punto de inflamabilidad de todas las mezclas inflamables. Algunos autores han investigado mezclas acuosas de sustancias inflamables, Astbury *et al.* (2004) analizaron varias mezclas de solventes inflamables en solución acuosa algunas de ellas son: metil acetato, metil etil cetona (MEK), acetonitrilo, 2,3-butanodiona, entre otros. Por su parte, Liaw *et al.* (2013) analizó mezclas acuosas de n-butanol, 2-butanol, 1-pentanol, isobutanol, butil acetato entre otras, validando para su predicción el modelo UNIFAC. Por otra parte, Janes *et al.*, (2014) evaluaron el punto de inflamabilidad de mezclas binarias de agua con acetona y otros solventes. Recientemente, Lakzian *et al.* (2020), utiliza la ecuación de estado cúbica de asociación (CPA) para predecir los puntos de inflamación. El modelo se aplica a mezclas parcialmente miscibles de agua y alcohol. Por otra parte, el cambio en el punto de inflamabilidad de mezclas de biodiesel con algunos ácidos grasos etílicos ha sido estudiado por Costa do Nascimento *et al.* (2020), mostrando que el modelo UNIFAC predice adecuadamente el comportamiento de punto de inflamación en estas mezclas.

Esta revisión de la literatura muestra que se han reportado varios trabajos sobre la predicción del punto de

inflamación de mezclas acuosas. Sin embargo, no se ha reportado el estudio del comportamiento del FP de la fermentación ABE. En este sentido, es importante estimar el punto de inflamabilidad en los productos de la fermentación ABE en dilución acuosa porque la miscibilidad de estos solventes con el agua puede afectar su comportamiento frente al fuego. Conocer este valor permite prevenir accidentes, controlar las condiciones de operación y almacenamiento de los productos y evitar incendios o explosiones en las plantas de fermentación o en lugares donde se utilicen estos solventes.

MATERIALES Y METODOS

El propósito de esta investigación se centra en la determinación precisa de la temperatura de inflamación de las soluciones mencionadas. Para ello, se utilizó un equipo de tipo copa cerrada Pensky-Martens de la marca Shenkai, modelo SYP1002B-IV. Este equipo está equipado con un termómetro digital de alta precisión, con una desviación de ± 0.1 °C. Además, se empleó un sistema de baño de recirculación capaz de calentar y enfriar el sistema de manera controlada. Con el propósito de recopilar datos en diversas concentraciones, se llevaron a cabo preparaciones de mezclas que contenían acetona + agua, butanol + agua y etanol + agua, abarcando un rango de concentraciones que varió desde el 100% al 1.5% en volumen/volumen (sustancia inflamable/agua). Por último, se llevó a cabo una ejecución experimental en la que se diluyó la mezcla ABE con agua. Se modificaron los porcentajes volumétricos de la mezcla ABE en un rango que abarcó desde el 3.8 %v/v hasta el 17.5 %v/v, asegurando que cada muestra mantuviera la relación másica característica de la mezcla ABE, que consiste en 3 partes de acetona, 6 partes de butanol y 1 parte de etanol. Las sustancias empleadas presentaban las siguientes especificaciones: acetona de la marca Meyer, con un nivel de pureza del 99.83%, n-butanol de la marca Meyer, con un nivel de pureza del 99.97%, y etanol de la marca Sigma-Aldrich, con una pureza superior al 99.5%. La medición de volúmenes se realizó con cristalería clase A.

El proceso de análisis inicia con verter las mezclas, previamente definidas en sus respectivas concentraciones, en la copa hasta alcanzar la línea de llenado establecida. Posteriormente, la copa fue introducida en el equipo y sellada. La fuente de ignición se acercó a la mezcla sellada, y la temperatura del punto de inflamación se determinó mediante la observación del destello generado. Cada medición del punto de inflamación se realizó por triplicado, asegurando así la confiabilidad de los resultados obtenidos.

El ajuste de los datos experimentales se basó en el modelo matemático propuesto por Liaw & Chiu (2006) y Liaw *et al.* (2008). Este modelo se fundamenta en una adaptación de la ecuación de Le Chatelier para la evaluación del punto de inflamabilidad, complementada con la aplicación de la ecuación de Antoine para el cálculo de las presiones de saturación. La ecuación de Antoine se presenta como una herramienta sólida y aplicable para la predicción del punto de inflamabilidad en mezclas inflamables que contienen sustancias tanto miscibles como parcialmente miscibles. La distinción crítica entre ellas se encuentra en los parámetros de interacción necesarios para la estimación de la función gamma. Es importante mencionar que dichos parámetros pueden obtenerse tanto a partir de datos de equilibrio líquido-vapor como de equilibrio líquido-líquido, tal como ha sido documentado por Liaw *et al.* (2006) y Liaw *et al.* (2008). En el contexto de nuestro estudio, se optó por emplear los parámetros derivados del equilibrio líquido-vapor, los cuales fueron tomados de la base de datos del simulador Aspen Plus. Además, se emplearon modelos termodinámicos reconocidos, tales como el NRTL, UNIFAC, UNIQUAC y Wilson, para la estimación del coeficiente de actividad, el cual resulta fundamental para calcular la fracción vapor (y_i) de los componentes inflamables para determinar la temperatura de inflamación en mezclas de sustancias inflamables en agua, fue imperativo cumplir con la condición propuesta por Astbury *et al.* (2004), que se encuentra expresada en la ecuación 1. Para ello, recurrimos a la herramienta Solver de Microsoft Excel, la cual nos permitió identificar la temperatura que satisface dicha ecuación. Esta temperatura representa el punto en el cual la presión de vapor de la mezcla acuosa alcanza la concentración mínima requerida para la inflamabilidad ($P_{i_{T_{mix}}}^{sat}$).

$$\sum_{i \neq k}^n \frac{P_i^{sat}}{y_i P} P_i^{sat} - P_{i_{T_{mix}}}^{sat} = 0 \quad (1)$$

donde el componente inflamable es indicado como componente i , el agua es indicada como componente k , P es la presión del sistema y P_i^{sat} es la presión de vapor de la sustancia inflamable, evaluada en el punto de ebullición de la mezcla acusa a la composición x_i y $P_{i,fp}^{sat}$ es presión de vapor de la sustancia pura, i , en su punto de inflamación.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados de la medición del punto de inflamabilidad de la mezcla etanol + agua se muestran en la Tabla 1. Se puede observar que el punto de inflamabilidad del etanol aumentó de 17.6 a 65.8 °C con porcentaje v/v de 99.5 y 2.0, respectivamente. Según norma NFPA-30 esta mezcla pasa de ser extremadamente inflamable ($FP < 23^\circ\text{C}$) a líquido inflamable ($60^\circ\text{C} < FP < 93^\circ\text{C}$) (NFPA, 2008).

Tabla 1; Punto de inflamabilidad experimental de la mezcla etanol + agua.

%v/v	X (mol) Etanol	Temperatura de inflamación (°C)	Desviación estándar	Incertidumbre
99.5	0.98	17.6	0.153	0.088
89.6	0.72	27.1	0.10	0.058
79.6	0.54	30.5	0.153	0.088
69.7	0.41	33.9	0.346	0.200
59.7	0.31	35.6	0.361	0.208
49.8	0.23	36.5	0.346	0.200
39.8	0.16	37.8	0.265	0.153
29.9	0.11	42.5	0.208	0.120
19.9	0.07	46.8	0.200	0.115
10.0	0.03	54.2	0.208	0.120
8.0	0.02	58	0.321	0.186
6.0	0.01	59.9	0.153	0.088
4.0	0.01	63.3	0.200	0.115
2.0	0.006	65.8	0.404	0.233

El cambio en el punto de inflamación de la mezcla butanol + agua es presentado en la Tabla 2. Se puede observar que el punto inflamación cambió de 34.9 a 45.5°C de 99.4 y 3.0 %V/v, respectivamente. Para esta mezcla su clasificación pasó de una clasificación muy inflamable ($23^\circ\text{C} < FP < 38^\circ\text{C}$) a líquido inflamable ($60^\circ\text{C} < FP < 93^\circ\text{C}$). A concentraciones volumétricas menores al 2% no se presentó punto de inflamación.

Tabla 2; Punto de inflamabilidad experimental de la mezcla butanol + agua

%v/v	X (mol) butanol	Temperatura de inflamación (°C)	Desviación estándar	Incertidumbre
99.4	0.96	34.9	0.208	0.120
89.4	0.62	41.0	0.379	0.219
79.5	0.42	42.7	0.321	0.186
69.5	0.30	42.6	0.321	0.186
59.6	0.22	42.8	0.115	0.067
49.7	0.16	43.1	0.265	0.153
39.7	0.11	43.4	0.306	0.176
29.8	0.07	43.7	0.351	0.203
19.8	0.04	43.2	0.416	0.240
9.9	0.02	43.0	0.153	0.088
8.5	0.01	43.2	0.265	0.153
7.1	0.01	43.6	0.153	0.088
4.2	0.008	44.0	0.300	0.173
3.0	0.006	45.5	0.306	0.176

La Tabla 3, muestra el cambio en el punto de inflamación de las disoluciones acetona + agua, se puede observar que el rango de concentración medido fue reducido (1.9 a 39.8%v/v), en comparación de las dos mezclas

anteriores, esto se debe a las limitaciones del baño de recirculación, utilizado para el control de la temperatura, el cual solo permitió bajar la temperatura hasta -6°C , lo cual fue insuficiente para evaluar mezclas con alta concentración de acetona, pues la bibliografía indica que el punto de inflamación de la acetona pura es de -18°C . Sin embargo, los resultados experimentales muestran que la tasa de incremento del punto de inflamación es más pronunciada para las mezclas acetona-agua. La mezcla de acetona a una concentración volumétrica de 39.8 %v/v registra un FP de -2.6°C , mientras que a una concentración de 1.9 %v/v registra un FP de 37.7°C , pasando de ser una mezcla extremadamente inflamable ($\text{FP} < 23^{\circ}\text{C}$) a una altamente inflamable ($23^{\circ}\text{C} < \text{FP} < 38^{\circ}\text{C}$) a pesar de tener una concentración baja.

Tabla 3: Punto de inflamabilidad experimental de la mezcla acetona + agua

%v/v	X (mol) acetona	Temperatura de inflamación ($^{\circ}\text{C}$)	Desviación estándar	Incertidumbre
39.8	0.139	-2.6	0.153	0.088
29.8	0.094	2.8	0.115	0.067
19.9	0.057	10.6	0.200	0.115
9.9	0.026	22.3	0.058	0.033
7.9	0.020	23.7	0.810	0.468
5.9	0.015	25.6	0.265	0.153
3.9	0.010	34.4	0.200	0.115
1.9	0.004	37.7	0.153	0.088

En la Tabla 4, se presenta el cambio de temperatura de inflamación para la mezcla de ABE con agua. Destaca que una mezcla con un 17% v/v de ABE muestra un punto de inflamación de 27.1°C , categorizándose como altamente inflamable según la NFPA-30 ($23^{\circ}\text{C} < \text{FP} < 38^{\circ}\text{C}$). Por otro lado, una concentración volumétrica del 3.7% revela una temperatura de inflamación de 48.6°C , considerada como fácilmente inflamable ($38^{\circ}\text{C} < \text{FP} < 60^{\circ}\text{C}$). Estos resultados plantean preocupaciones de seguridad, ya que podrían desencadenar incendios en caso de derrames cerca de una fuente de ignición al salir del fermentador.

Tabla 4: Punto de inflamabilidad experimental de mezcla ABE + agua

X (mol) ABE	%v/v ABE	butanol (gr)	etanol (gr)	acetona (gr)	T inflamación ($^{\circ}\text{C}$)	Desviación estándar	Incertidumbre
0.046	17.468	6.012	1.085	3.012	27.2	0.212	0.15
0.042	15.991	5.498	0.961	2.786	29.4	0.071	0.05
0.036	14.153	4.877	0.874	2.399	31.3	0.212	0.15
0.031	12.424	4.228	0.750	2.146	32.7	0.212	0.15
0.026	10.683	3.667	0.633	1.795	34.3	0.354	0.25
0.022	8.591	3.010	0.570	1.560	38.7	0.424	0.30
0.018	7.333	2.457	0.496	1.265	41.5	0.707	0.50
0.012	5.376	1.896	0.357	0.660	44.6	0.071	0.05
0.009	3.791	1.236	0.236	0.616	48.7	0.495	0.35

Los datos experimentales de cada mezcla se comparan con cuatro modelos termodinámicos ampliamente usados para este tipo de mezclas. La Figura 1 a) muestra la predicción del punto de inflamación de los modelos Termodinámicos NRTL, UNIFAC, UNIQUAC y Wilson en comparación con los datos experimentales de la mezcla etanol + agua. Se puede apreciar que los cuatro modelos predicen de manera similar el comportamiento del punto de inflamabilidad, es notorio que el mayor error de predicción de los modelos es a concentraciones bajas de etanol. La predicción del punto de inflamación de la mezcla butanol + agua en comparación con los datos experimentales se muestran en la Figura 1 b). Donde se puede apreciar que los modelos NRTL, UNIFAC y UNICUAQ predicen de manera similar el cambio del punto de inflamación, siendo muy notoria la diferencia con el modelo de Wilson, esto debido a que el modelo de Wilson asume que las fuerzas intermoleculares entre las moléculas son comparables o se comportan de manera similar en toda la gama de composiciones de la mezcla. Sin embargo, en el caso de la mezcla de butanol y agua, esta suposición no se cumple, pues tienen polaridades muy distintas.

La comparación entre los datos experimentales y las predicciones de los modelos para la mezcla de acetona y agua se ilustra en la Figura 2 a). Se observa que los cuatro modelos exhiben un comportamiento similar en el rango de concentraciones desde un 39.8% hasta un 1.9% en volumen de acetona. Para concentraciones inferiores al 1.9% en volumen, los modelos NRTL y Wilson muestran un comportamiento muy similar, mientras que UNIFAC predice valores más cercanos a los datos experimentales en esta región de baja concentración con un error de 1.9%. En contraste, UNIQUAC presenta un error de hasta el 7.8% en esta concentración, lo que indica una divergencia significativa entre los modelos a concentraciones menores al 10% molar de la sustancia inflamable.

En la Figura 2b, se muestra el cambio en el punto de inflamabilidad de la mezcla ABE en solución acuosa, similar a lo que se podría obtener durante la fermentación. En las concentraciones evaluadas, no se observó la formación de dos fases líquidas. Estos datos se analizaron utilizando exclusivamente el modelo NRTL. Es importante destacar que los valores predichos por el modelo son consistentemente mayores en todo el rango de concentraciones evaluado. El error promedio es del 3%, con un máximo de 5.7% observado a una concentración del 3.8% v/v de mezcla ABE, equivalente a 1.23 gramos de butanol, 0.23 gramos de etanol y 0.61 gramos de acetona en 67.56 gramos de agua.

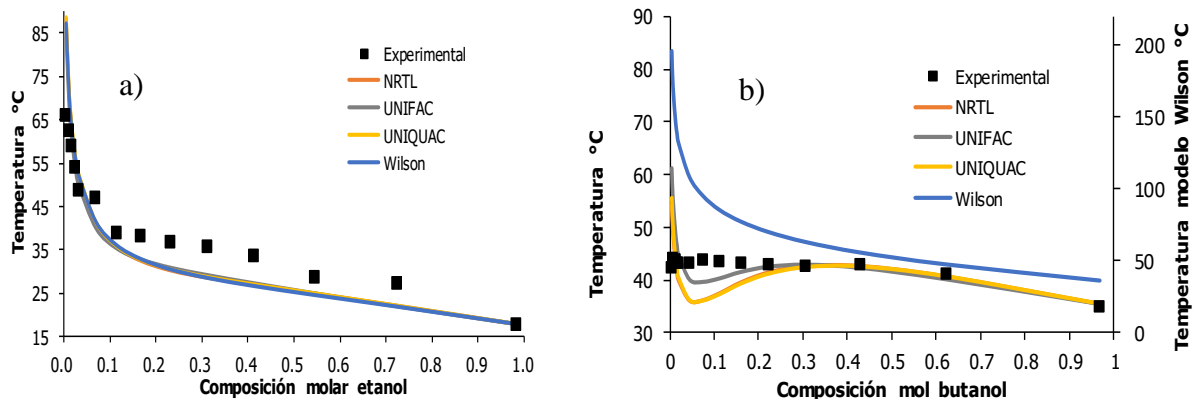


Fig. 1: Temperatura de inflamación predicha Vs Experimental a) etanol + agua, b) butanol + agua

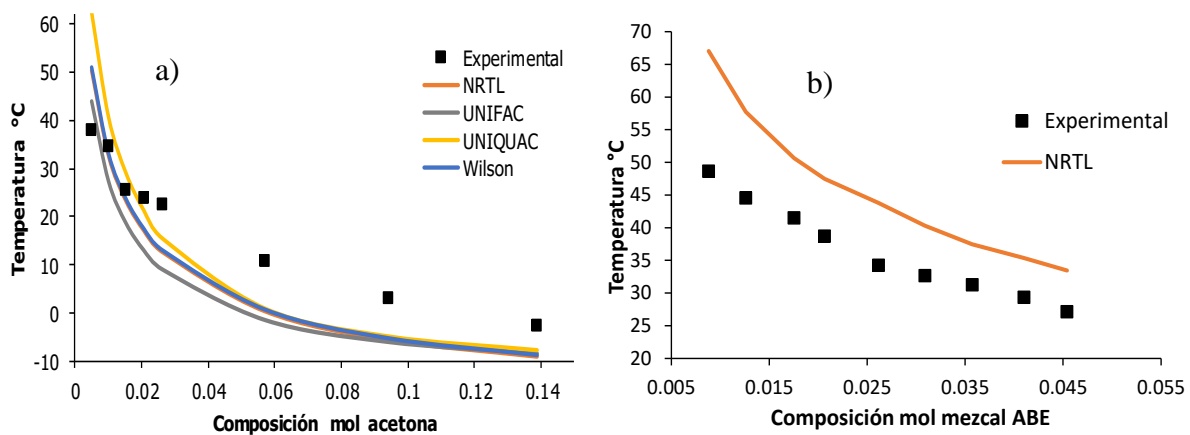


Fig. 2: Temperatura de inflamación predicha Vs Experimental a) acetona + agua, b) ABE + agua

Resumiendo, se tiene que para la mezcla etanol + agua los 4 modelos propuestos ajustan de manera muy similar, sin embargo, el modelo UNIFAC presentó el menor error porcentual 1.5%, mientras que NRTL, UNIQUAC y Wilson tuvieron un error porcentual de 1.8%. Para la mezcla butanol + agua el modelo que mejor predice su comportamiento es NRTL con un porcentaje de error de 1.1%, por el contrario, el método de Wilson es el más alejado a la tendencia con un error porcentual promedio de 18%. Finalmente, para la mezcla acetona + agua los

modelos de Wilson y NRTL tienen un error porcentual parecido de 2.4% y 2.5%, respectivamente. La Tabla 5 muestra los errores porcentuales promedio para cada uno de los casos.

Tabla 5: Errores porcentuales de los modelos termodinámicos.

etanol + agua		butanol + agua		acetona + agua	
Modelo	% error	Modelo	% error	Modelo	% error
NRTL	1.89	NRTL	1.11	NRTL	2.52
UNIFAC	1.53	UNIFAC	1.25	UNIFAC	3.01
UNIQUAC	1.88	UNIQUAC	1.16	UNIQUAC	2.81
Wilson	1.82	Wilson	18.70	Wilson	2.40

CONCLUSIONES

En este trabajo, se ha llevado a cabo un análisis del cambio en el punto de inflamabilidad de las mezclas acuosas de etanol, butanol, acetona y mezcla ABE, un aspecto relevante en la industria de los biocombustibles. A través de los experimentos, se demostró que las disoluciones de estas sustancias inflamables mantienen su nivel de peligrosidad, incluso cuando se diluyen hasta un 2% en volumen. Desde una perspectiva de seguridad, esto implica que los procesos relacionados con la fermentación ABE pueden estar sujetos a situaciones potenciales de explosiones e incendios. Con relación a los modelos termodinámicos que se evaluaron, se observó un margen de error en la predicción del punto de inflamabilidad a concentraciones bajas. Entre los modelos probados, NRTL y UNIFAC han demostrado un mejor desempeño en este sistema. Sin embargo, se hace necesario ajustar los parámetros de interacción de estas mezclas utilizando las concentraciones y temperaturas presentadas en este estudio; este ajuste se llevará a cabo en investigaciones futuras. Finalmente, los hallazgos resaltan la importancia de continuar investigando en el campo de la seguridad de los bioprocesos y los biocombustibles. Estas investigaciones son esenciales para prevenir accidentes, salvaguardar a los trabajadores en todas las etapas de manipulación, almacenamiento y transporte de estas sustancias, y en última instancia, para optimizar la producción.

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco por el apoyo otorgado a este trabajo.

REFERENCIAS

- Abdehagh, N., Tezel, F.H. & Thibault, J. (2014). Separation techniques in butanol production: Challenges and developments. *Biomass and Bioenergy*, 60, 222-246.
- Astbury, G., Bugand-Bugandet, J., Grollet, E. & Stell, K. (2004). Flash points of aqueous solutions of flammable solvents. *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.*, 150, 1-18.
- Costa do Nascimento, D., Conti, D.C., Barbosa Neto, A.M. & Costa, M.C. (2021). Flash point measurement and prediction of dodecane + ethanol + FAEE systems. *Fuel*, 306, 121723.
- Costa do Nascimento, D., Dorighello Carareto, N.D., Marinho Barbosa Neto, A., Gerbaud, V. & da Costa, M.C. (2020). Flash point prediction with UNIFAC type models of ethylic biodiesel and binary/ternary mixtures of FAEEs. *Fuel*, 281, 118717-118717.
- Daroch, M., Zhu, J.-H. & Yang, F. (2017). Biological process for butanol production. *Biomass to Renewable Energy Processes*, CRC Press, 249-298.
- Dessie, W., Luo, X., Wang, M., Feng, L., Liao, Y., Wang, Z., *et al.* (2020). Current advances on waste biomass transformation into value-added products. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 104 (11), 4757-4770.

- Haghtalab, A., Seyf, J.Y. & Mansouri, Y. (2016). Flash point prediction of the binary and ternary systems using the different local composition activity coefficient models. *Fluid Phase Equilibria*, 415, 58-63.
- Huo, X., Lu, Q. & Wang, J. (2022). Liaw-UNIFAC flash point model for alcohols-kerosene/diesel fuel blends using average fuel structure. *Process Safety and Environmental Protection*, 160, 400-410.
- Janes, A. & Chaineaux, J. (2013). *Experimental Determination of Flash Points of Flammable Liquid Aqueous Solutions*. Chemical Engineering Transactions, 31. 943-948. 10.3303/CET1331158.
- Jin, Q., Qureshi, N., Wang, H. & Huang, H. (2019). Acetone-butanol-ethanol (ABE) fermentation of soluble and hydrolyzed sugars in apple pomace by *Clostridium beijerinckii* P260. *Fuel*, 244, 536-544.
- Lakzian, K., Hosseiniallahchal, S., Jalaei Salmani, H. & Sanjarifard, A. (2020). Flash point prediction of binary totally and partially miscible water-alcohol mixtures by cubic-plus-association (CPA) equation of state. *Thermochimica Acta*, 691, 178719.
- Lakzian, K. & Liaw, H.-J. (2021). Flash point investigation of ternary mixtures of 1-butanol/2-pentanol + acetic acid + ethylbenzene. *Process Safety and Environmental Protection*, 154, 131-141.
- Li, Y., Tang, W., Chen, Y., Liu, J. & Lee, C.-f. F. (2019). Potential of acetone-butanol-ethanol (ABE) as a biofuel. *Fuel*, 242, 673-686.
- Liaw, H.-J. (2013). Study of Two Different Types of Minimum Flash-Point Behavior for Ternary Mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52 (22), 7579-7585.
- Liaw, H.-J. & Chiu, Y.-Y. (2006). A general model for predicting the flash point of miscible mixtures. *Journal of Hazardous Materials*, 137 (1), 38-46. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2006.01.078>
- Liaw, H. J., Chen, C. T. & Gerbaud, V. (2008). Flash-point prediction for binary partially miscible aqueous-organic mixtures. *Chemical Engineering Science*, 63(18), 4543-4554.
- Martínez-Gomez, J., Sánchez-Ramírez, E., Quiroz-Ramírez, J.J., Segovia-Hernandez, J.G., Ponce-Ortega, J.M. & El-Halwagi, M.M. (2016). Involving economic, environmental and safety issues in the optimal purification of biobutanol. *Process Safety and Environmental Protection*, 103(Part B), 365-376.
- NFPA (2008). National Fire Protection Association. NFPA 30: código de líquidos inflamables y combustibles. OPCI.
- Phoon, L.Y., Mustaffa, A.A., Hashim, H. & Mat, R. (2014). A Review of Flash Point Prediction Models for Flammable Liquid Mixtures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(32), 12553-12565.
- Silpa, K., Yao, L.C., Bhada-Tata, P. & Van Woerden, F. (2018). "What a Waste 2.0: A Global Snapshot of Solid Waste Management to 2050". *Urban Development World Bank*. from <http://hdl.handle.net/10986/30317>.
- Veza, I., Muhamad Said, M.F. & Latiff, Z.A. (2021). Recent advances in butanol production by acetone-butanol-ethanol (ABE) fermentation. *Biomass and Bioenergy*, 144, 105919.
- Vilas-Boas, S.M., do Nascimento, D.C., Dias, R.M., Roza, G.H., Barbosa Neto, A.M., Ferreira, O., et al. (2023). Flash point of binary and ternary monoterpene mixtures: Experimental and modeling. *Process Safety and Environmental Protection*, 172, 1048-1057.