

Manuel de la Fuente¹, Juan Cubero-Cardoso^{1,2}, Miguel Mauricio Iglesias¹

¹CRETUS, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Santiago de Compostela; ²Laboratorio de tecnología circular y sostenible, CIDERTA and Chemistry Department, Faculty of Experimental Sciences, Universidad de Huelva

Introducción. La fermentación anaerobia de residuos orgánicos permite la valorización de dichos residuos en ácidos grasos volátiles (AGV), compuestos de gran interés para su uso en la industria química o en la preparación de biocombustibles, entre otros. La futura aplicación de estos procesos en un contexto industrial obliga al desarrollo de tecnologías que permitan obtener mediciones en tiempo real del espectro de productos, contribuyendo así a un mejor control y, en última instancia, a un mayor rendimiento del proceso productivo. Este trabajo tiene como objetivo la comparación de técnicas de espectroscopía vibracional (Espectroscopías Infrarroja (IR) y Raman), para la monitorización de AGV durante la fermentación anaerobia.

PLANTEAMIENTO INICIAL

Fermentación anaerobia en cultivo mixto

- Producción dirigida de AGV a partir de residuos orgánicos
- Necesidad de control sobre el espectro de productos

- ✓ Las Espectroscopías Infrarroja y Raman podrían permitir la monitorización en tiempo real
- ✓ Su combinación con modelos quimiométricos permite la diferenciación y cuantificación de especies químicas



ATR-FTIR-MIR:
150 scans, Res.
4 cm⁻¹



Raman 1064 nm:
20 exp., 15 s.,
Láser 100%

CALIBRADOS EN AGUA

15 disoluciones poco correlacionadas de HAc, HPr y HBU (rango 0,10-20,0 g/L) (Cabaneros López et al.)

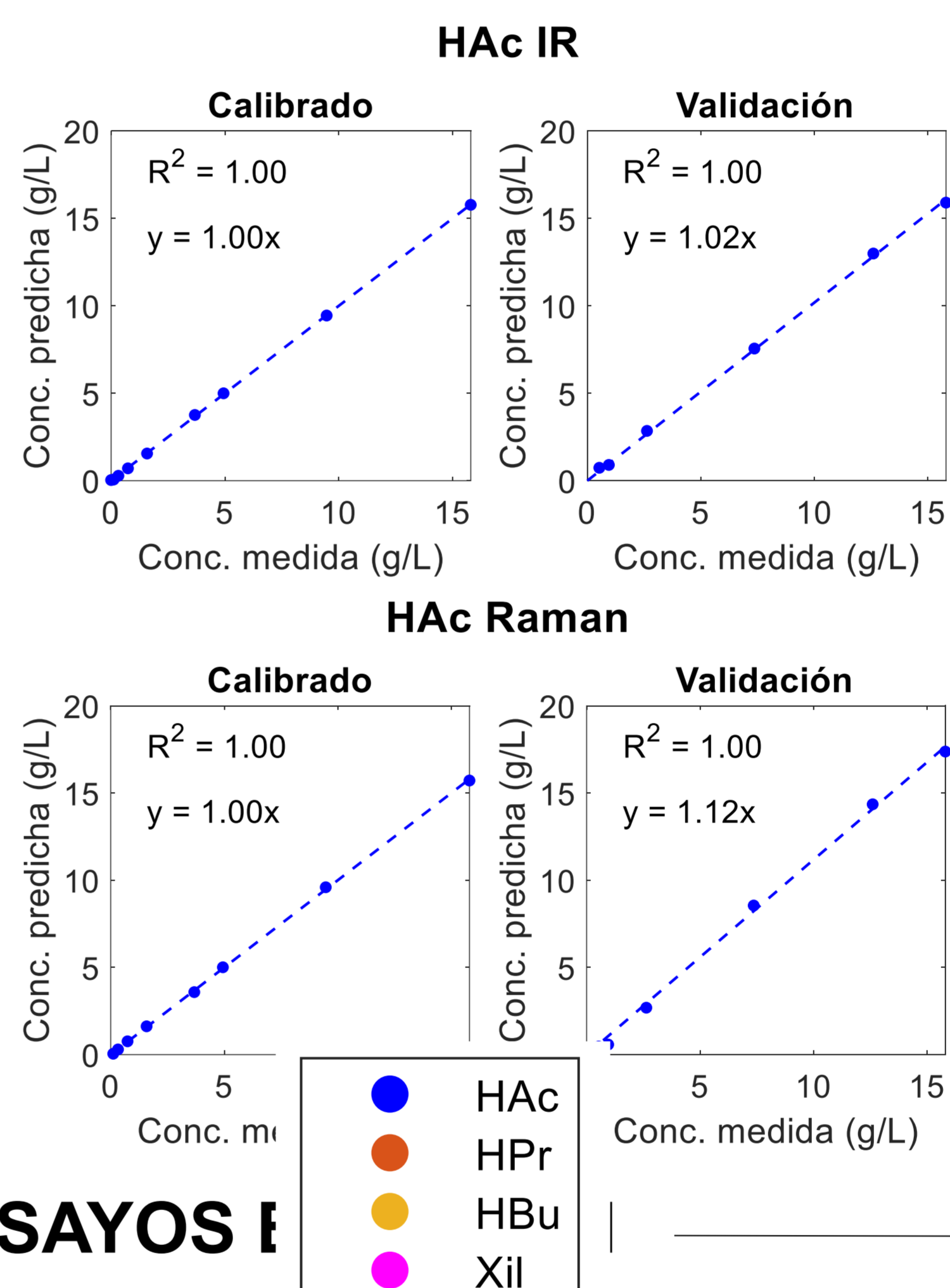
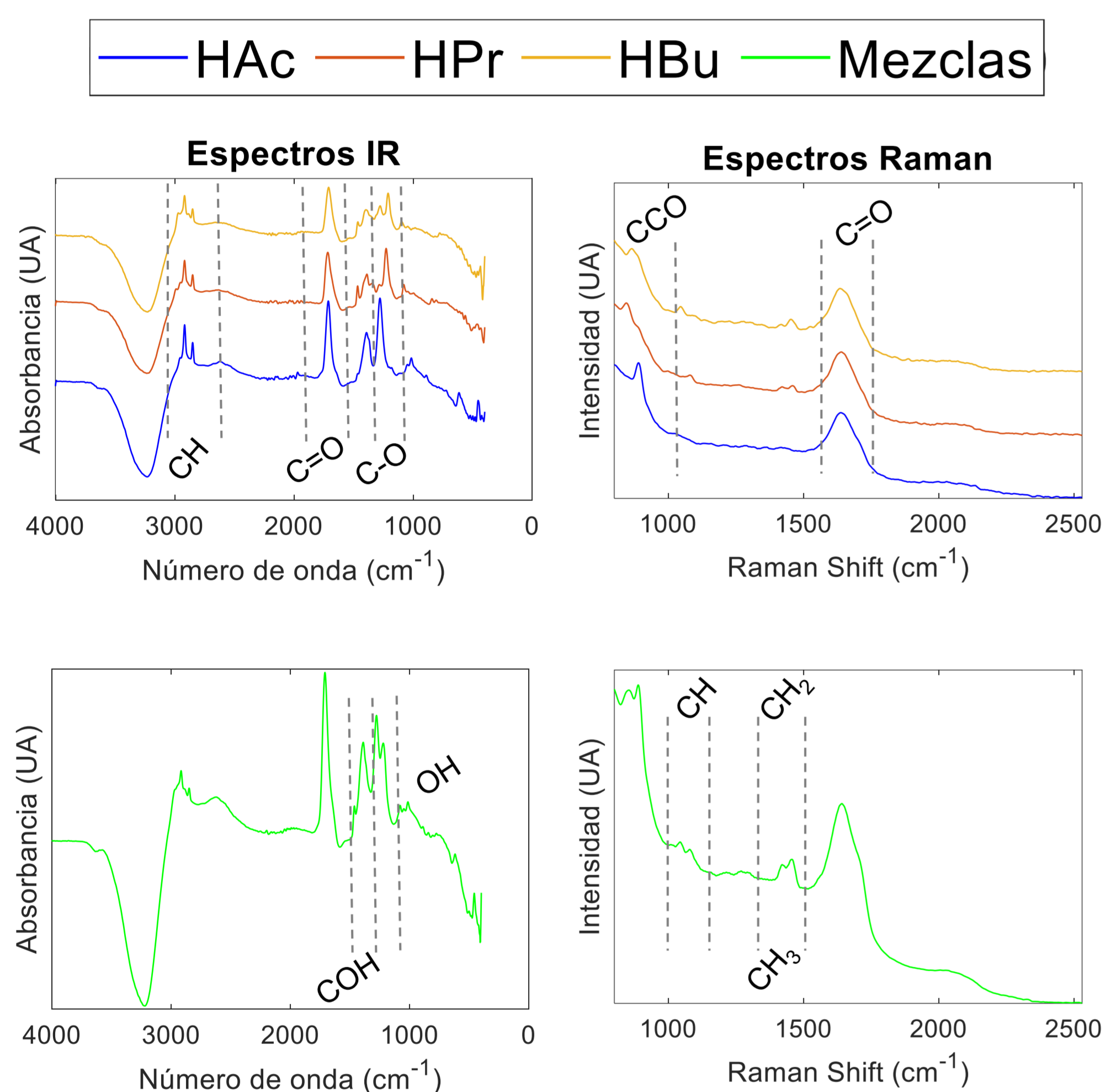
Procesado espectral

1. **Centrado:** Resta del espectro medio
2. **Suavizado:** Filtro de Savitzky-Golay
3. **Primera derivada:** Corrección de línea de base y definición de máximos/mínimos
4. **Segunda derivada:** Puntos de inflexión (si hay necesidad de más resolución)

PLS ("Projection on latent structures"): algoritmo que modela una relación lineal entre los datos espectroscópicos y la concentración

	m	R ²
HPr (IR/Raman)	1,02/1,12	1,00
HBU (IR/Raman)	1,00/1,03	1,00

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2}{N}}$$



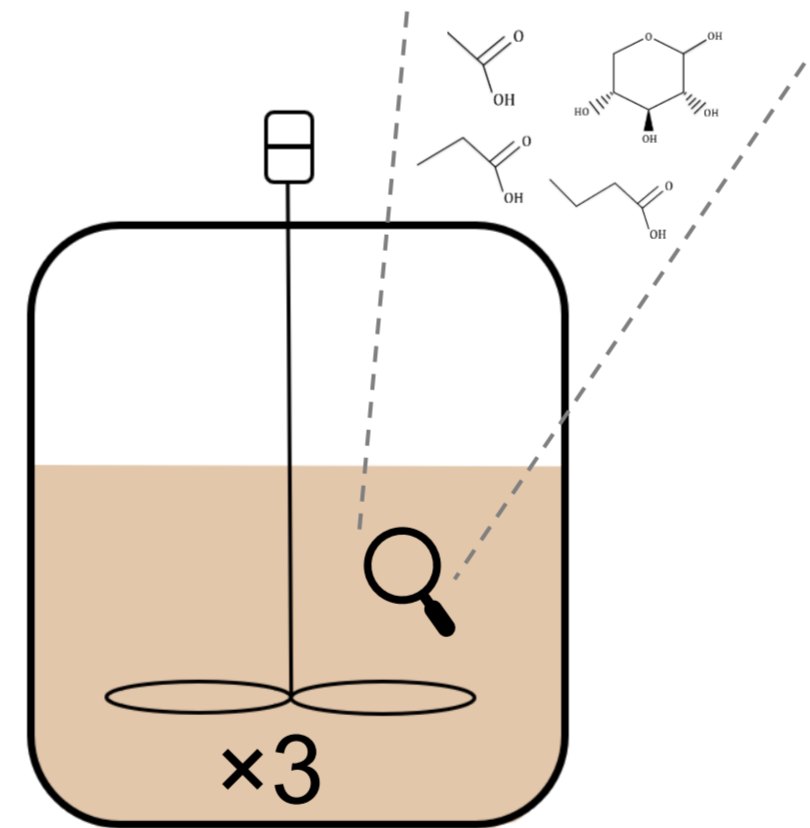
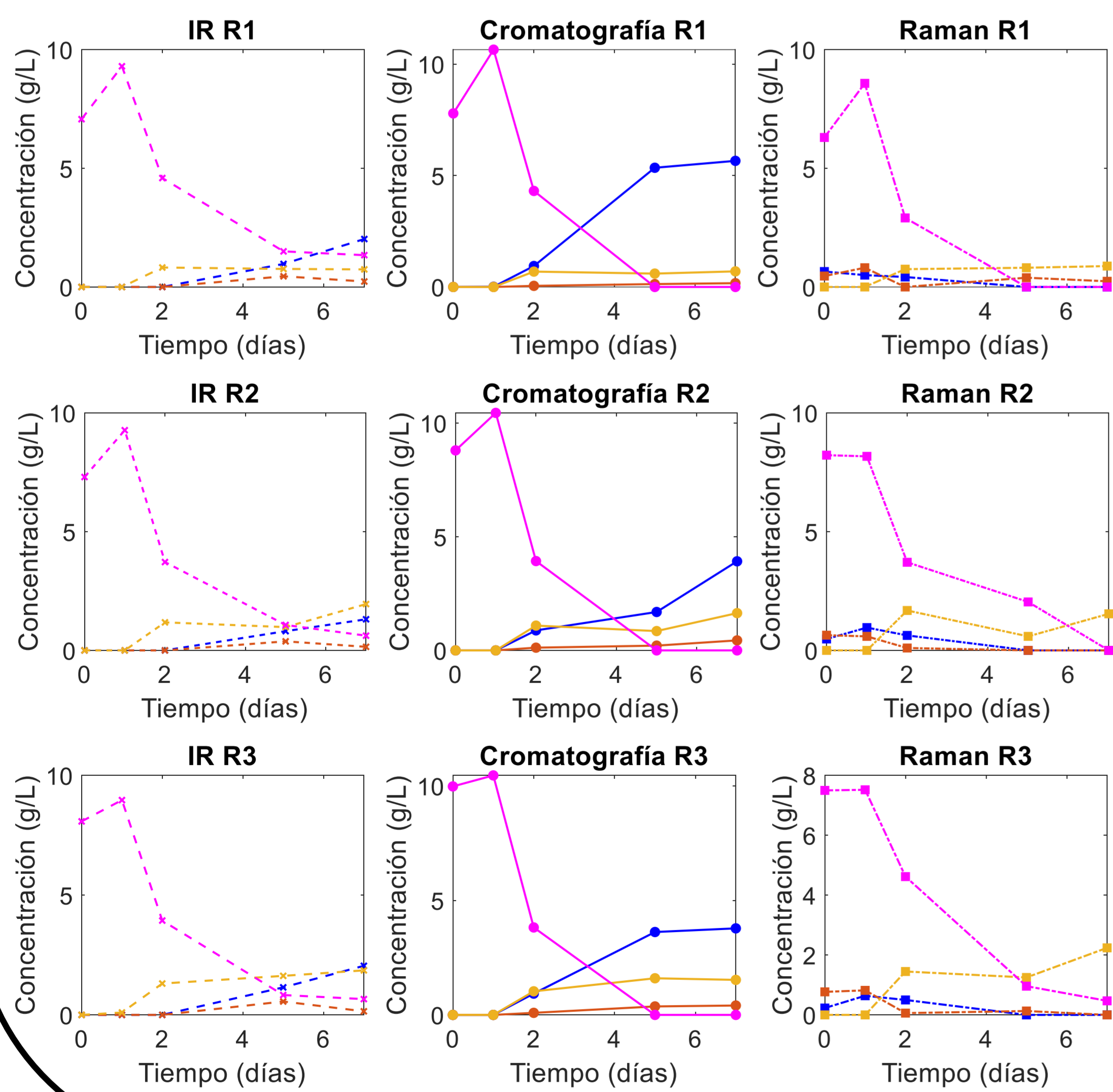
→ Predicciones óptimas para los tres AGV en IR (RMSEV < 0,30 g/L)

→ Peores resultados con Raman (RMSEV ≈ 1,00 g/L), excepto para HBU (0,33 g/L)

→ Ambas técnicas permiten una buena cuantificación de AGV en matriz acuosa

MONITORIZACIÓN DE ENSAYOS I

CALIBRADOS EN AGUA

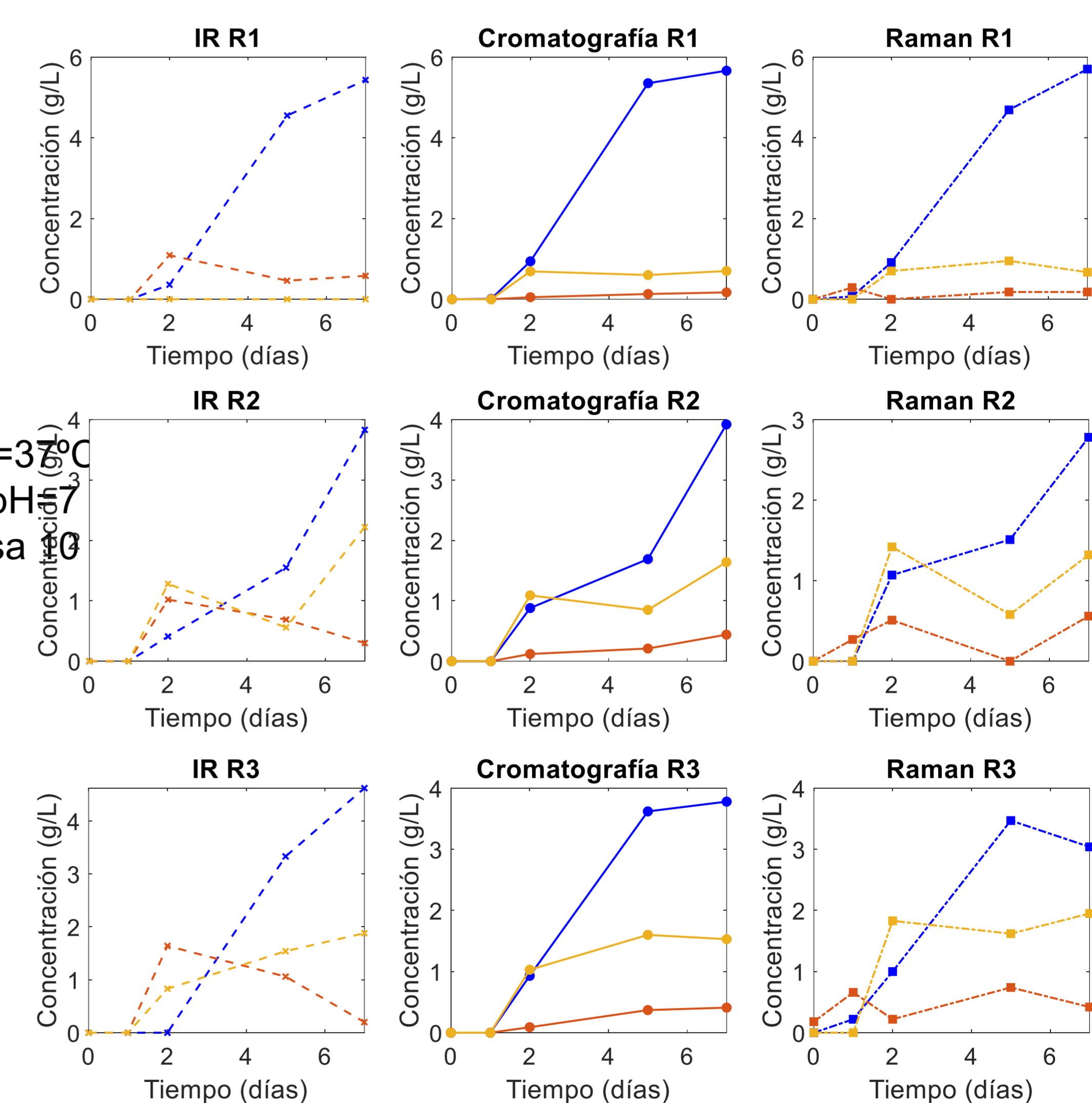


→ El calibrado en agua describe la dinámica de HBU, pero la de HAc requiere de un calibrado en caldo de fermentación (R² ≥ 0,99)

→ Las concentraciones de HPr son demasiado bajas para evaluar el modelo (< 0,45 g/L)

→ Cuando la xilosa está presente las predicciones son muy acertadas, pero está por debajo del límite de cuantificación.

CALIBRADOS EN CALDO DE FERMENTACIÓN



Conclusiones

- Tanto la Espectroscopía Infrarroja como la Espectroscopía Raman son firmes candidatos para la monitorización en tiempo real de AGV durante la fermentación anaerobia.
- La espectroscopía infrarroja parece ser superior a la espectroscopía Raman para los tres compuestos en todo el rango de concentraciones.

Referencias:

Lopez PC, Udegama IA, Thomsen ST, Roslander C, Junicke H, Mauricio-Iglesias M, et al. Towards a digital twin: a hybrid data-driven and mechanistic digital shadow to forecast the evolution of lignocellulosic fermentation. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*. 2020 Sep 1;14(5):1046-60.

Agradecimientos:

Este trabajo es parte del Proyecto WATCHER (CNS2022-135594), financiado por la Agencia Estatal de Investigación. (10.13039/501100011033), y la Unión Europea NextGeneration EU/PRTR.