



Prediksi Data Kesetimbangan Cair-cair Pada Sistem Terner Air + Asam Laktat + Pelarut Menggunakan Model UNIFAC-DMD

Kurniawan Wahyu Sugiarto¹, Faradiba Honora¹, Saidah Altway^{1*}, dan Daril Ridho Zuchrillah¹

¹Departemen Teknik Kimia Industri, FV, ITS, Jalan Raya ITS Sukolilo Kota Surabaya Jawa Timur 60111

*E-mail: saidahaltway@chem-eng.its.ac.id

Abstract

Industrial lactic acid can be produced via chemical synthesis and fermentative production. However, due to the environmental issue and consumer preference, fermentative production of lactic acid is preferable. Lactic acid is used in many industries, including food processing, pharmaceutical, chemical and cosmetic industries. Various methods have been developed for separating lactic acid from its aqueous solution, and liquid-liquid extraction is considered as the most promising and efficient method. Liquid-liquid equilibrium data provide the basis for a rational design and optimal extraction operation. The objective of this study is to predict the liquid-liquid equilibria in the ternary systems of water+ lactic acid + solvent (MIBK, 2-pentanol, 1-hexanol) at temperatures of 303.15 K and 313.15 K and atmospheric pressure (101.3 kPa) using the UNIFAC-Dortmund (DMD) model. The distribution coefficients and separation factors were determined to evaluate the extraction performance of lactic acid. The extraction performance was in the order of MIBK > 1-hexanol > 2-pentanol. The prediction of lactic acid + water + MIBK system at 303,15 K was also compared with the experimental data with the RMSD 2,5 %. This result represented that UNIFAC-DMD was a reliable model for the prediction of liquid-liquid equilibria of system involving lactic acid.

Keywords: Lactic Acid; Liquid-Liquid Equilibria; Liquid-Liquid Extraction; UNIFAC

Pendahuluan

Asam laktat (LA) merupakan asam karboksilat yang penting karena aplikasinya di berbagai industri seperti industri farmasi, kosmetik, bahan kimia, dan makanan (Beg, 2021). Ini dapat digunakan untuk produksi etanol, polimer akrilik, dan propilen glikol (Lux and Siebenhofer, 2013). Asam laktat dapat diproduksi dengan metode biologis (fermentasi) atau kimia (sintesis kimia) (Komesu *et al.*, 2017). Produksi LA melalui fermentasi mikroba (metode biologis) adalah metode yang ramah lingkungan (Halley and Dorgan, 2011) dan menawarkan beberapa keuntungan dibandingkan metode kimia, seperti persyaratan temperatur yang relatif rendah, konsumsi energi yang lebih sedikit, dan kemungkinan produksi LA dengan kemurnian lebih tinggi (Sauer *et al.*, 2008). Dalam kasus produksi LA melalui metode kimia, asetaldehida direaksikan dalam fase cair dengan hidrogen sianida di bawah tekanan tinggi untuk menghasilkan Laktonitril yang kemudian dimurnikan dengan proses distilasi yang mana akan membutuhkan biaya yang cukup tinggi (Castillo Martinez *et al.*, 2013). Karena tingginya biaya prosedur pemisahan, pemisahan LA dari hilir sangat penting dan sulit. Metode ekstraksi cair-cair adalah metode yang mudah, murah, dan berkelanjutan untuk memulihkan asam karboksilat (Kumar, Shende and Wasewar, 2020). Oleh karena itu untuk mendapatkan LA dengan kemurnian tinggi diperlukan proses pemurnian seperti adsorbsi, destilasi, membran, dan ekstraksi (Sofiya *et al.*, 2019). Metode ekstraksi cair-cair (LLE) dipilih karena memiliki selektivitas tinggi, penggunaan yang luas di bidang industri, dan dapat komponen dari campuran *azeotropic* atau yang memiliki titik didih yang hampir sama (Shaahmadi, Anbaz and Bazooyar, 2018).

Untuk pengembangan proses LLE diperlukan data kesetimbangan yang berupa data komposisi kesetimbangan di kedua fase. Data ini diperlukan untuk mendapatkan hasil ekstraksi dengan kemurnian tinggi. Data kesetimbangan cair-cair memiliki peranan penting, yaitu sebagai acuan untuk perancangan kolom eksstraksi ataupun optimasi proses eksstraksi (Gomis *et al.*, 2011). Beberapa penelitian terkait pengukuran kesetimbangan cair-cair yang telah dilakukan yaitu pengukuran kesetimbangan cair-cair sistem (air + asam laktat + MIBK pada temperatur 308.15 K). Oleh karena itu, tujuan dari penelitian ini adalah menyajikan data prediksi kesetimbangan cair-cair pada sistem baru menggunakan model UNIFAC DMD untuk pemisahan asam laktat dengan pelarut (2-pentanol, 1-hexanol, MIBK) pada temperatur 303,15K dan 313,15K serta tekanan atmosfer dan mengetahui kinerja solvent (2-pentanol, 1-hexanol, MIBK) yang paling optimal dalam memisahkan asam format dari *aqueous solution*-nya.

Metode Penelitian





Ekstraksi cair-cair adalah suatu metode pemisahan untuk memisahkan satu atau lebih komponen dalam suatu campuran homogen dengan penambahan pelarut cair yang membuatnya terpisah menjadi dua fase yaitu fase organik dan fase aqueous. Performansi dari nilai proses ekstraksi ditentukan dari nilai *separation factor* dan koefisien distribusi. *Separation factor* didefinisikan sebagai rasio dari koefisien distribusi pada *solute* (D_2) terhadap koefisien distribusi pada air (D_1). Selain itu, berfungsi untuk menentukan kemampuan dari pelarut untuk secara selektif mengekstrak zat terlarut dari larutan awal. Sedangkan untuk koefisien distribusi dari komponen i merupakan rasio dari fraksi massa komponen i di fase organik terhadap fraksi massa komponen i di fase *aqueous* yang ditunjukkan pada persamaan berikut ini.

$$S = \frac{D_2}{D_1} = \frac{W_2^I/W_2^{II}}{W_1^I/W_1^{II}}$$

Dimana W_2^I adalah fraksi massa zat terlarut di fase organik, W_2^{II} adalah fraksi massa zat terlarut di fase aqueous, W_1^I adalah fraksi massa air di fase organik, dan W_1^{II} adalah fraksi massa air di fase aqueous.

Prediksi kesetimbangan cair-cair sistem sistem air + asam laktat + *solvent* (2-pentanol, 1-hexanol, MIBK) menggunakan aplikasi Aspen Plus V11. Prediksi kesetimbangan uap-cair ini menggunakan model UNIFAC DMD pada temperatur 303.15 K dan 313.15 K pada tekanan 101.3 kPa. Model UNIFAC *Dortmund* (DMD) dipilih karena menunjukkan prediksi data eksperimen lebih baik dibandingkan model lainnya. Standar deviasi (RMSD%) menunjukkan perbedaan dari hasil data eksperimen dan perhitungan. Standar deviasi dikatakan baik jika nilainya kurang dari lima, dimana semakin mendekati nol akan lebih baik (Asoodeh, Eslami and Sadrameli, 2019). Model UNIFAC-DMD merupakan modifikasi dari model UNIFAC untuk memprediksi koefisien aktivitas pada pengenceran tak hingga γ^∞ dan ketergantungan temperatur (Constantinescu and Gmehling, 2016a).

$$\ln \gamma_i^C = 1 - V'_i + \ln V'_i - 5q_i \left(1 - \frac{V_i}{F_i} + \ln \frac{V_i}{F_i} \right) \quad (1)$$

dimana V_i , F_i , dan q_i adalah *mole fraction of compound i in the mixture*, *surface area/mole fractions ratios*, dan van der waals surface area komponen i . Sedangkan untuk *volume/mole fraction ratio* V'_i menggunakan persamaan:

$$V'_i = \frac{r_i^{3/4}}{\sum_j r_j^{3/4} x_j} \quad (2)$$

dimana r_i adalah *relative van der waals volume of compound i* dan x adalah fraksi mol. Sehingga, persamaan UNIFAC DMD sebagai berikut.

$$\Psi_{nm} = \exp \left(- \frac{a_{nm} + b_{nm}T + c_{nm}T^2}{T} \right) \quad (3)$$

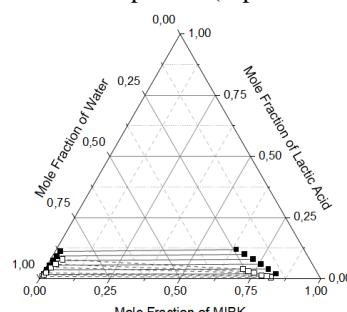
Dimana ketergantungan temperature dari parameter interaksi Ψ_{nm} antara gugus fungsi n dan m dijelaskan menggunakan parameter a_{nm} , b_{nm} , dan c_{nm}

Hasil dan Pembahasan

Penelitian yang dilakukan oleh Cháfer et al. (2012), dengan sistem air + asam laktat + MIBK pada temperatur 303.15 K dapat dilihat pada Gambar 1. Dari data eksperimen yang didapat kemudian dibandingkan dengan menggunakan model UNIFAC dan UNIFAC-DMD. Perbedaan dari hasil data eksperimen dan perhitungan dengan model termodinamika dapat dinyatakan dengan *root mean square deviation* (RMSD). Untuk mendapatkan RMSD digunakan rumus sebagai berikut:

$$\%RMSD = 100\% \sqrt{\frac{\sum_i \sum_\alpha \sum_k (w_{ik}^{\alpha(\text{exp})} - w_{ik}^{\alpha(\text{cal})})^2}{2gn}} \quad (4)$$

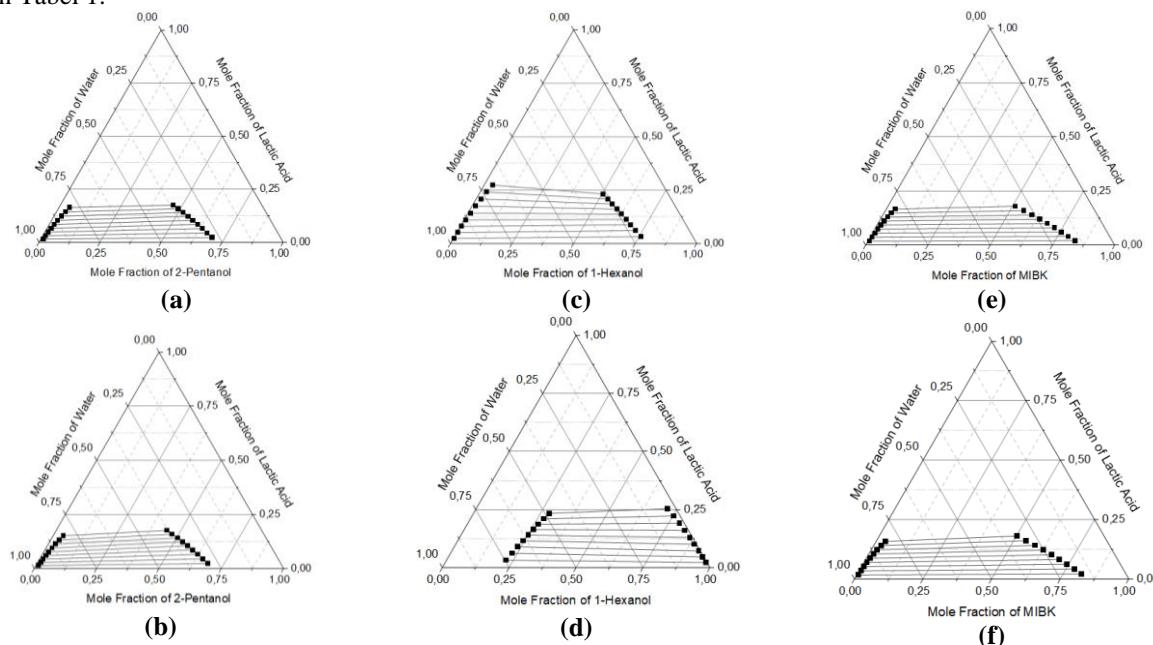
Dari hasil RMSD yang didapat dengan kedua model termodinamika akan dibandingkan dan didapatkan hasil RMSD sebesar 4% dengan menggunakan model UNIFAC dan 2,5% dengan menggunakan model UNIFAC-DMD. Hal ini menunjukkan bahwa model UNIFAC-DMD dapat memberikan hasil akurasi yang lebih baik untuk prediksi LLE pada sistem air + asam asetat + pelarut organik (MIBK). Sehingga prediksi selanjutnya akan menggunakan UNIFAC DMD untuk sistem air + asam laktat + pelarut (2-pentanol dan 1-hexanol) pada temperatur 303,15 K dan



Gambar 1. Data eksperimen (--□--) dan data perhitungan (---■--) dengan model UNIFAC DMD pada sistem asam laktat + air + MIBK pada temperatur 303,15 K

313,15 K pada tekanan 101,3 kPa. Selain itu pada model ini, bagian kombinatorial dimodifikasi untuk meningkatkan hasil sistem asimetris sehingga hasil prediksi menjadi lebih akurat dibandingkan dengan model sebelumnya (Constantinescu and Gmehling, 2016b).

Data prediksi kesetimbangan cair-cair pada sistem terner air + asam laktat + pelarut (2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK) yang terukur pada temperatur 303,15 K dan 313,15 K pada tekanan 101,3 kPa yang disajikan pada Gambar 2 dan Tabel 1.



Gambar 2. Diagram fase pada prediksi kesetimbangan cair-cair sistem (a) air + asam laktat + 2-pentanol 303,15 K, (b) air + asam laktat + 2-pentanol pada temperatur 313,15 K, (c) air + asam laktat + 1-hexanol pada temperatur 303,15 K, (d) asam laktat + air + 1-hexanol pada temperatur 313,15 K, (e) asam laktat + air + MIBK 303,15 K, (f) asam laktat + air + MIBK pada temperatur 313,15 K

Pada penelitian ini, data kesetimbangan cair-cair diprediksi dengan model termodinamika UNIFAC-DMD. Selain dapat dilihat melalui grafik data kesetimbangan juga tertera pada Tabel 1. Dapat dilihat data prediksi kesetimbangan cair-cair, *separation factor* dan koefisien distribusi pada sistem air (1) + asam laktat (2) + solvent (2-pentanol / 1-hexanol / methyl isobutyl ketone) pada temperatur 303.15 K dan 313.15 pada tekanan 101.3 kPa.

Tabel 1. Data prediksi kesetimbangan cair-cair, *separation factor*, dan koefisien distribusi

Sistem	Organic Phase			Aqueous Phase			D_2	D_1	S
	W_1^I	W_2^I	W_3^I	W_1^{II}	W_2^{II}	W_3^{III}			
Lactic Acid + Water + 2-Pentanol pada Temperatur 303,15 K	0,2798	0,0226	0,6975	0,9746	0,0150	0,0104	1.51	0.287	5.25
	0,2892	0,0442	0,6666	0,9567	0,0310	0,0123	1.43	0.302	4.72
	0,2987	0,0649	0,6365	0,9374	0,0479	0,0146	1.35	0.319	4.25
	0,3083	0,0846	0,6070	0,9168	0,0657	0,0175	1.29	0.336	3.83
	0,3183	0,1037	0,5780	0,8949	0,0842	0,0209	1.23	0.356	3.46
	0,3285	0,1222	0,5493	0,8715	0,1035	0,0251	1.18	0.377	3.13
	0,3393	0,1402	0,5205	0,8466	0,1232	0,0302	1.14	0.401	2.84
Lactic Acid + Water + 2-Pentanol pada Temperatur 313,15 K	0,3508	0,1578	0,4914	0,8202	0,1434	0,0364	1.10	0.428	2.57
	0,3631	0,1752	0,4617	0,7921	0,1639	0,0440	1.07	0.458	2.33
	0,2930	0,0227	0,6842	0,9760	0,0137	0,0103	1.66	0.300	5.52
Lactic Acid + Water + 1-Hexanol pada Temperatur 303,15 K	0,3025	0,0445	0,6530	0,9597	0,0283	0,0120	1.57	0.315	5.00
	0,3122	0,0654	0,6224	0,9422	0,0436	0,0142	1.50	0.331	4.52

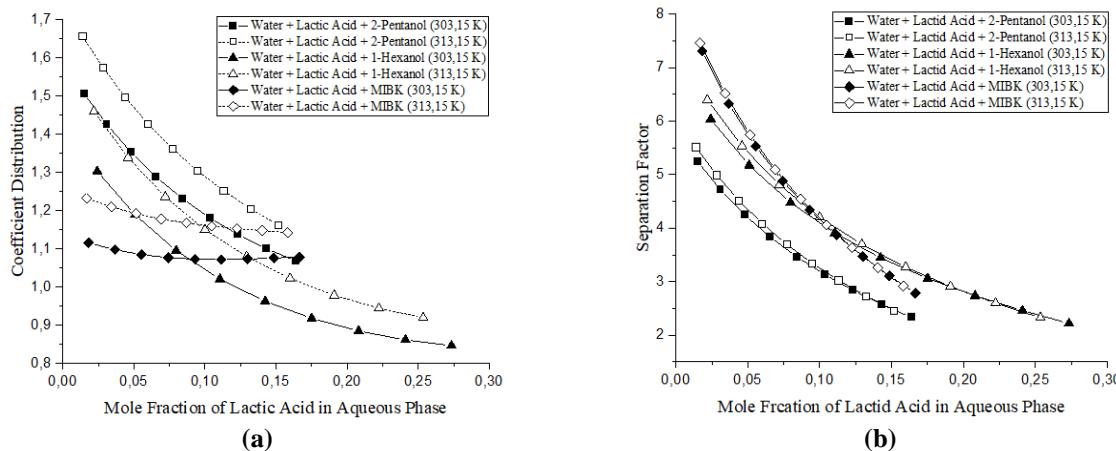


	0,3223	0,0854	0,5923	0,9234	0,0598	0,0168	1.43	0.349	4.09
	0,3327	0,1047	0,5626	0,9033	0,0768	0,0199	1.36	0.368	3.70
	0,3436	0,1234	0,5330	0,8818	0,0945	0,0237	1.31	0.390	3.35
	0,3551	0,1414	0,5034	0,8587	0,1129	0,0284	1.25	0.414	3.03
	0,3674	0,1590	0,4736	0,8341	0,1319	0,0340	1.21	0.441	2.74
	0,3808	0,1761	0,4431	0,8076	0,1513	0,0411	1.16	0.472	2.47
Lactic Acid + Water + 1-Hexanol pada Temperatur 303,15 K	0,2101	0,0315	0,7584	0,9727	0,0242	0,0031	1.30	0.216	6.03
	0,2171	0,0605	0,7223	0,9449	0,0509	0,0042	1.19	0.230	5.17
	0,2239	0,0875	0,6887	0,9144	0,0798	0,0057	1.10	0.245	4.48
	0,2304	0,1128	0,6568	0,8816	0,1105	0,0079	1.02	0.261	3.91
	0,2368	0,1372	0,6261	0,8469	0,1424	0,0107	0.96	0.280	3.44
	0,2432	0,1608	0,5960	0,8104	0,1751	0,0145	0.92	0.300	3.06
	0,2498	0,1843	0,5659	0,7725	0,2081	0,0194	0.89	0.323	2.74
	0,2568	0,2078	0,5354	0,7332	0,2411	0,0258	0.86	0.350	2.46
	0,2644	0,2317	0,5039	0,6925	0,2735	0,0340	0.85	0.382	2.22
Lactic Acid + Water + 1-Hexanol pada Temperatur 313,15 K	0,2226	0,0319	0,7455	0,9751	0,0219	0,0030	1.46	0.228	6.39
	0,2299	0,0615	0,7086	0,9500	0,0459	0,0041	1.34	0.242	5.53
	0,2371	0,0891	0,6738	0,9224	0,0721	0,0055	1.24	0.257	4.81
	0,2443	0,1151	0,6407	0,8926	0,1000	0,0074	1.15	0.274	4.20
	0,2514	0,1398	0,6088	0,8606	0,1294	0,0100	1.08	0.292	3.70
	0,2587	0,1636	0,5777	0,8267	0,1599	0,0134	1.02	0.313	3.27
	0,2662	0,1869	0,5469	0,7910	0,1910	0,0180	0.98	0.336	2.91
	0,2742	0,2101	0,5158	0,7538	0,2224	0,0239	0.94	0.364	2.60
	0,2828	0,2333	0,4839	0,7149	0,2536	0,0315	0.92	0.396	2.33
Lactic Acid + Water + Methyl Isobutyl Ketone (MIBK) pada Temperatur 303,15 K	0,1490	0,0203	0,8306	0,9761	0,0182	0,0057	1.12	0.153	7.31
	0,1660	0,0403	0,7937	0,9559	0,0367	0,0074	1.10	0.174	6.32
	0,1835	0,0601	0,7564	0,9351	0,0554	0,0095	1.09	0.196	5.53
	0,2017	0,0799	0,7185	0,9138	0,0742	0,0120	1.08	0.221	4.88
	0,2207	0,0997	0,6796	0,8920	0,0929	0,0151	1.07	0.247	4.34
	0,2407	0,1196	0,6397	0,8697	0,1115	0,0188	1.07	0.277	3.87
	0,2620	0,1396	0,5984	0,8466	0,1300	0,0233	1.07	0.309	3.47
	0,2847	0,1597	0,5556	0,8228	0,1484	0,0288	1.08	0.346	3.11
	0,3093	0,1798	0,5109	0,7978	0,1667	0,0355	1.08	0.388	2.78
Lactic Acid + Water + Methyl Isobutyl Ketone (MIBK) pada Temperatur 313,15 K	0,1615	0,0208	0,8177	0,9775	0,0169	0,0056	1.23	0.165	7.46
	0,1780	0,0413	0,7808	0,9587	0,0341	0,0072	1.21	0.186	6.52
	0,1950	0,0615	0,7435	0,9394	0,0516	0,0091	1.19	0.208	5.74
	0,2127	0,0815	0,7058	0,9194	0,0692	0,0114	1.18	0.231	5.09
	0,2312	0,1015	0,6673	0,8988	0,0869	0,0143	1.17	0.257	4.54
	0,2506	0,1214	0,6280	0,8776	0,1047	0,0177	1.16	0.286	4.06
	0,2712	0,1413	0,5876	0,8557	0,1225	0,0219	1.15	0.317	3.64
	0,2931	0,1611	0,5458	0,8328	0,1403	0,0269	1.15	0.352	3.26
	0,3168	0,1808	0,5024	0,8087	0,1582	0,0331	1.14	0.392	2.92

Variasi koefisien distribusi dan faktor pemisahan asam laktat sebagai fungsi dari fraksi mol zat terlarut dalam fasa air untuk sistem terner pada temperatur yang berbeda ditunjukkan pada Gambar 2. Pelarut 2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK digunakan sebagai pelarut pada penelitian ini karena alkohol dan keton merupakan pelarut yang baik dan banyak digunakan sebagai pelarut pada proses ekstraksi. Selain itu, kelarutan 2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK dengan air yang rendah menjadi kelebihan untuk proses ekstraksi yang mana dapat mengurangi solvent loss dan juga

energi yang digunakan untuk proses *recycle* pelarut dan pemurnian produk menjadi lebih efisien. Hal ini dapat dilihat dari nilai distribusi koefisien dari air yang rendah pada Tabel 1.

Berdasarkan Gambar 2 dapat dilihat bahwa *tie-line* dari sistem air + asam laktat + pelarut secara keseluruhan memiliki *slope* yang positif, hal ini mengindikasikan bahwa koefisien distribusi asam laktat lebih dari satu, kecuali pada komposisi asam laktat yang tinggi untuk sistem 1-hexanol, koefisien distribusi berkisar antara 0,85-0,98 yang juga dapat dilihat pada Tabel 1. *Slope tie-line* yang positif dan nilai koefisien distribusi yang lebih besar dari satu menunjukkan bahwa kandungan asam laktat di fase organik lebih besar dibandingkan dengan kandungan asam laktat di fase aqueous. Dari hasil ini dapat disimpulkan kinerja ekstraksi asam laktat yang baik dengan ketiga pelarut yg digunakan pada penelitian ini.



Gambar 3. Grafik data lle (a) Distribusi Koefisien Air + Asam Laktat + *Solvent* (2-pentanol / 1-hexanol / MIBK) pada temperatur 313,15 K dan 323,15 K, (b) *Separation Factor* Air + Asam Laktat + *Solvent* (2-pentanol / 1-hexanol / MIBK) pada temperatur 313,15 K dan 323,15K.

Koefisien distribusi dan *separation factor* untuk setiap *solvent* dijelaskan pada Tabel 1 dan Gambar 3. Efektivitas dari ekstraksi dapat dilihat dari faktor pemisahannya dan koefisien distribusi, yang merupakan indikasi kemampuan pelarut untuk memisahkan asam dari air. Dari prediksi data kesetimbangan cair-cair, didapatkan kinerja *solvent* dari yang terbaik yaitu MIBK > 1-hexanol > 2-pentanol. Dari prediksi data kesetimbangan cair-cair, didapatkan nilai koefisien distribusi MIBK 0,85 kali lipat dari 1-hexanol dan 0,75 kali lipat dari 2-pentanol. Temperatur berperan penting bagi kesetimbangan cair-cair. Pada Gambar 3 (a) dapat dilihat bahwa temperatur berpengaruh pada nilai koefisien disrtibusi. Semakin tinggi temperatur, maka koefisien distribusi juga semakin naik. Selain itu, nilai *separation factor* MIBK lebih besar 1,39 kali lipat dari 2-pentanol dan 1,2 kali lipat dari 1-hexanol. Performasi ekstraksi dikatakan baik jika nilai *separation factor* dan koefisien distribusi lebih dari satu, yang berarti ekstraksi asam laktat dengan menggunakan *solvent* (2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK) dapat dilakukan. Dari penelitian yang telah dilakukan, dapat disimpulkan bahwa model UNIFAC-DMD cocok digunakan untuk memprediksi data kesetimbangan cair-cair pada sistem air + asam laktat + *solvent* (2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK).

Kesimpulan

Pada penelitian ini dilakukan prediksi pada sistem air + asam laktat + *solvent* (2-pentanol, 1-hexanol, dan MIBK) pada temperatur 303,15 K dan 313,15 K menggunakan model termodinamika UNIFAC-DMD. Data Prediksi sistem asam laktat + air + MIBK pada 303,15 K juga dibandingkan dengan data eksperimen dengan RMSD 2,5 %. Hasil ini menunjukkan bahwa UNIFAC-DMD adalah model yang cocok untuk prediksi kesetimbangan cair-cair sistem yang melibatkan asam laktat. Koefisien distribusi dan faktor pemisahan ditentukan untuk mengevaluasi kinerja ekstraksi asam laktat. Urutan *solvent* dari yang terbaik yaitu MIBK > 1-hexanol > 2-pentanol.

Daftar Notasi

- a_{nm} = interaction parameter of mod. UNIFAC
- b_{nm} = interaction parameter of mod. UNIFAC
- c_{nm} = interaction parameter of mod. UNIFAC
- C = combinatorial part of the activity coefficient
- D = koefisien distribusi
- ln = natural logarithm (base e)
- T = temperatur [K]
- S = separation factor





Ψ	= kelompok parameter interaksi
γ	= koefisien aktivitas volume/mole fraction of compound i in the mixture
V'	= modified volume/mole fraction of compound i in the mixture
V_i	= volume/mole fraction of compound i in the mixture
W_1	= fraksi mol air
W_2	= fraksi mol asam
W_3	= fraksi mol solvent
r	= volume relative komponen
r_i	= relative van der waals volume of compound i
x_j	= mole fraction component j
Z	= lattice coordination number

Daftar Pustaka

- Asoodeh, A., Eslami, F. and Sadrameli, S.M. (2019) ‘Liquid–liquid equilibria of systems containing linseed oil biodiesel + methanol + glycerol: Experimental data and thermodynamic modeling’, *Fuel*, 253(November 2018), pp. 460–473.
- Beg, D. (2021) ‘Liquid-liquid extraction of lactic acid using non-toxic solvents’, *ScienceDirect* [Preprint].
- Castillo Martinez, F.A. *et al.* (2013) ‘Lactic acid properties, applications and production: A review’, *Trends in Food Science and Technology*, 30(1), pp. 70–83.
- Cháfer, A. *et al.* (2012) ‘Measurements and correlation of liquid-liquid equilibria of 4-methyl-2-pentanone+ethanol+water and 4-methyl-2-pentanone+n-butanol+water ternary systems between 283.2 and 323.2K’, *Fluid Phase Equilibria*, 317, pp. 89–95.
- Constantinescu, D. and Gmehling, J. (2016a) ‘Further development of modified UNIFAC (Dortmund): Revision and extension 6’, *Journal of Chemical and Engineering Data*, 61(8), pp. 2738–2748.
- Constantinescu, D. and Gmehling, J. (2016b) ‘Further development of modified UNIFAC (Dortmund): Revision and extension 6’, *Journal of Chemical and Engineering Data*, 61(8), pp. 2738–2748.
- Gomis, A.M. *et al.* (2011) ‘G E Models and Algorithms for Condensed Phase Equilibrium Data Regression in Ternary Systems : Limitations and Proposals’, (34), pp. 48–62.
- Halley, P.J. and Dorgan, J.R. (2011) ‘Next-generation biopolymers: Advanced functionality and improved sustainability’, *MRS Bulletin*, 36(9), pp. 687–691.
- Ismail, S. *et al.* (2007) ‘(Liquid + liquid) equilibria of (water + propionic acid + dibasic esters) ternary systems’, *Journal of Chemical Thermodynamics*, 39(11), pp. 1493–1499.
- Komesu, A. *et al.* (2017) ‘Lactic Acid Production to Purification: A Review’, *BioResources*, 12(2), pp. 4364–4383. Available at: <https://doi.org/10.15376/BIORES.12.2.KOMESU>.
- Kumar, A., Shende, D.Z. and Wasewar, K.L. (2020) ‘Extractive separation of levulinic acid using natural and chemical solvents’, *Chemical Data Collections*, 28, p. 100417.
- Li, Q. *et al.* (2020a) ‘Experimental determination and modeling of liquid-liquid equilibrium for water + diethoxymethane + methyl tert-butyl ether (or methyl isobutyl ketone) at 298.15, 308.15, and 318.15 K’, *Fluid Phase Equilibria*, 505.
- Lux, S. and Siebenhofer, M. (2013) ‘Investigation of liquid-liquid phase equilibria for reactive extraction of lactic acid with organophosphorus solvents’, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 88(3), pp. 462–467.
- Sauer, M. *et al.* (2008) ‘Microbial production of organic acids: expanding the markets’, *Trends in Biotechnology*, 26(2), pp. 100–108.
- Shaahmadi, F., Anbaz, M.A. and Bazooyar, B. (2018) ‘The analysis of liquid–liquid equilibria (LLE) of toluene + heptane + ionic liquid ternary mixture using intelligent models’, *Chemical Engineering Research and Design*, 130, pp. 184–198.
- Sofiya, K. *et al.* (2019) ‘Separation of carboxylic acids from aqueous solutions using hollow fiber membrane contactors’, *Journal of Membrane Science and Research*, 5(3), pp. 233–239.

