

**DESARROLLO DE UN MODULO PARA LA  
SIMULACIÓN DE DIGESTORES ANAEROBIOS  
ACOPLADO AL SIMULADOR HYSYS 3.1**

**MARIO ANDRÉS HERNÁNDEZ PARDO  
HECTOR JAVIER LUNA WANDURRAGA**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2004**

**DESARROLLO DE UN MODULO PARA LA  
SIMULACIÓN DE DIGESTORES ANAEROBIOS  
ACOPLADO AL SIMULADOR HYSYS 3.1**

**MARIO ANDRÉS HERNÁNDEZ PARDO  
HECTOR JAVIER LUNA WANDURRAGA**

**Trabajo de Grado para optar al título de  
Ingeniero Químico**

**Director  
EDGAR F. CASTILLO  
Ingeniero Químico**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOQUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA**

**2004**

A Dios por darme la fortaleza, el conocimiento y la vida.  
A mis padres por la maravillosa educación que me dieron y la confianza que  
siempre han tenido en mí.  
A mis hermanos por ser mis mejores amigos y las personas que siempre  
estarán cuando necesite apoyo.  
A toda mi familia con la que siempre he podido contar.  
A *Tania* por compartir tantos momentos agradables conmigo.  
A mis amigos que me brindaron su apoyo en todo momento.

**Mario Andrés Hernández Pardo**

A Dios por darme la existencia, orientación y sabiduría.  
A mi madre por la formación basada en los valores: amor, respeto y  
perseverancia y por su esfuerzo entrega y dedicación.  
A mi familia por su apoyo moral.  
A mi hermano, Jorge, por su comprensión y apoyo incondicional.  
A Jaz por compartir gratos momentos a mi lado.  
A mis amigos y familiares que ya están en la eternidad.

*“Fácil es buscar, fácil no encontrar”*

**Hector Javier Luna Wandurraga**

## **AGRADECIMIENTOS**

Al Ph. D. Edgar Fernando Castillo, Director del proyecto por su guía, tenacidad, colaboración y apoyo al desarrollo del proyecto.

Al Ing. Diego Cristancho quien con su sabia orientación logro colmar nuestros objetivos en el desarrollo de este proyecto.

Al Ing. Ivan Ordoñez quien con sus aportes y paciencia nos ayudo en el direccionamiento de este proyecto.

A nuestros compañeros, amigos y todas aquellas personas que de una u otra forma colaboraron con alcanzar este título.

## CONTENIDO

	pág.
<b>INTRODUCCION</b>	1
<b>1. FUNDAMENTOS DE LA DIGESTIÓN ANAEROBIA</b>	3
1.1 ETAPAS DE LA DIGESTION ANAEROBIA	4
1.1.1 Hidrólisis de biopolímeros	4
1.1.2 Acidogénesis	7
1.1.3 Acetogénesis	7
1.1.4 Metanogénesis	8
1.2 RELACIONES ESTEQUIOMÉTRICAS PARA LA DIGESTIÓN ANAEROBIA	8
1.3 CINETICA MICROBIANA	9
1.3.1 Cinética de crecimiento	9
1.3.2 Mantenimiento	10
1.3.3 Metabolismo endógeno	11
1.3.4 Muerte de microorganismos	11
1.4 MODELOS CINÉTICOS PARA LA DIGESTIÓN ANAEROBIA	11
1.4.1 Modelo de Monod	12
1.4.2 Modelos alternativos	12
1.5 MODELOS DE INHIBICIÓN	14
1.5.1 Modelo de inhibición propuesto por Haldane	14
1.5.2 Modelo de inhibición del tipo no competitivo	15
1.5.3 Modelo de inhibición de Ph	15
1.6 DIGESTORES ANAEROBIOS	16
1.6.1 Tipos de digestores anaerobios	16
1.7 FACTORES QUE AFECTAN LA DIGESTIÓN ANAEROBIA	19
1.7.1 Temperatura	19
1.7.2 pH	19

1.7.3 Toxicidad	20
<b>2. MODELAMIENTO DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA</b>	<b>21</b>
2.1 MODELO CONCEPTUAL	22
2.1.1 Suposiciones del modelo	22
2.1.2 Proceso fisicoquímico	23
2.1.3 Proceso biológico	23
2.2 MODELO MATEMÁTICO	31
2.2.1 Balances de materia	32
2.2.2 Balances de materia para el digestor CSTR	32
2.2.3 Balance materia para el digestor UASB	37
2.3 DESARROLLO DEL MÓDULO DE SIMULACIÓN	38
2.3.1 Extensión	38
2.3.2 Algoritmo para el digestor CSTR	38
2.3.3 Descripción del algoritmo para el digestor UASB	40
2.3.4 Limitaciones de las extensiones	40
<b>3. ANALISIS DE SENSIBILIDAD</b>	<b>41</b>
3.1 ANALISIS REALIZADOS A LAS EXTENSIONES	41
3.1.1 Comportamiento de la concentración de la biomasa y el sustrato en función del TRH	42
3.1.2 Comportamiento del biogás en función del TRH	45
3.1.3 Comparación de los modelos cinéticos de inhibición simulados	47
3.1.4 Variación del pH contra el tiempo de retención hidráulico	50
3.1.5 Variación del flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico	51
3.1.6 Variación del porcentaje de metano en el biogás contra el tiempo de retención hidráulico	52
3.1.7 Variación de la biomasa metanogénica contra el tiempo de retención hidráulico	53
3.1.8 Variación del porcentaje de remoción de DQO contra el tiempo de retención hidráulico	54

3.1.9 Variación del flujo másico de metano contra la temperatura	55
3.1.10 Variación del flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico	56
3.2 INTEGRACIÓN DE LA EXTENSIÓN A HYSYS	56
3.2.1 Endulzamiento del biogás	57
3.2.2 Utilización del metano	59
<b>4. CONCLUSIONES</b>	<b>61</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>63</b>
<b>ANEXOS</b>	<b>66</b>

## LISTA DE TABLAS

	pág.
<b>Tabla 1.</b> Tasa de depolimerización de biopolímeros (mesofilico)	5
<b>Tabla 2.</b> Constantes hidrolíticas ( $d^{-1}$ ) para la hidrólisis de la celulosa en función de la temperatura y el tiempo de retención de sólidos	6
<b>Tabla 3.</b> Resumen de los parámetros cinéticos usando la ecuación de primer orden para la hidrólisis de la fracción orgánica de residuos sólidos municipales.	6
<b>Tabla 4.</b> Nivel de contaminantes en un digestor anaerobio	16
<b>Tabla 5.</b> Constantes de equilibrio usadas en el modelo	30
<b>Tabla 6.</b> Constantes cinéticas usadas en el modelo	31
<b>Tabla 7.</b> Factor de seguridad para cargas biológicas típicas	45
<b>Tabla 8.</b> Caracterización reportada de sustrato	49
<b>Tabla 9.</b> Comparación de la corriente de gas a la entrada y salida del proceso de endulzamiento	58
<b>Tabla 10.</b> Composición molar de las corrientes del reactor de conversión	60
<b>Tabla 11.</b> Coeficientes de rendimiento	87

## LISTA DE FIGURAS

	pág.
<b>Figura 1.</b> Representación esquemática de la digestión anaerobia	4
<b>Figura 2.</b> Diagrama de conversión del proceso	22
<b>Figura 3.</b> Diagrama del proceso biológico	25
<b>Figura 4.</b> Esquema de un reactor CSTR	32
<b>Figura 5.</b> Esquema conceptual del reactor UASB	37
<b>Figura 6.</b> Esquema de la variación de la biomasa en función del TRH	42
<b>Figura 7.</b> Esquema de la variación del sustrato en función del TRH	43
<b>Figura 8.</b> Comportamiento del biogás ( $\text{CH}_4$ y $\text{CO}_2$ ) en función del TRH	46
<b>Figura 9.</b> Comportamiento del $\text{H}_2\text{S}$ en el biogás en función del TRH	46
<b>Figura 10.</b> Comportamiento del $\text{H}_2\text{O}$ en el biogás en función del TRH	47
<b>Figura 11.</b> Comportamiento de la biomasa para el modelo de Monod y el de inhibición	48
<b>Figura 12.</b> Comportamiento del sustrato para el modelo de Monod y el de inhibición	49
<b>Figura 13.</b> pH contra el tiempo de retención hidráulico	50
<b>Figura 14.</b> Flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico	52
<b>Figura 15.</b> Porcentaje de metano contra el tiempo de retención hidráulico	52
<b>Figura 16.</b> Biomasa metanogénica contra el tiempo de retención hidráulico	53
<b>Figura 17.</b> %DQO removido contra el tiempo de retención hidráulico para cada digestor anaerobio	54
<b>Figura 18.</b> Flujo másico de metano contra temperatura	55
<b>Figura 19.</b> Flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico	56

<b>Figura 20.</b> Endulzamiento del biogás	58
<b>Figura 21.</b> Proceso de conversión de metano a hidrogeno	59
<b>Figura 22.</b> Modelo de digestión anaerobia de Hill y Barth	66
<b>Figura 23.</b> Modelo de digestión anaerobia de Moletta	66
<b>Figura 24.</b> Modelo de digestión anaerobia de Hill	67
<b>Figura 25.</b> Modelo de digestión anaerobia de Kalyuzhanyi	67
<b>Figura 26.</b> Modelo de digestión anaerobia de Bryers	68
<b>Figura 27.</b> Modelo de digestión anaerobia de Batstone	68
<b>Figura 28.</b> Modelo de digestión anaerobia ADM1	69
<b>Figura 29.</b> Director de objetos del <u>Extension View Editor</u>	70
<b>Figura 30.</b> Director de vistas del <u>Extension View Editor</u>	71
<b>Figura 31.</b> Menu Tools del simulador HYSYS 3.1	74
<b>Figura 32.</b> Preferencias de la sesión del simulador HYSYS 3.1	75
<b>Figura 33.</b> Vista Diseño del equipo	77
<b>Figura 34.</b> Vista Cinéticas del equipo	78
<b>Figura 35.</b> Vista Corriente de trabajo del equipo	80
<b>Figura 36.</b> Vista Funcionamiento del equipo	81
<b>Figura 37.</b> Vista Definición de la corriente del equipo	82
<b>Figura 38.</b> Vista de ayuda	83

## LISTA DE ANEXOS

	<b>pág.</b>
<b>Anexo A.</b> Modelos de la digestión anaerobia	66
<b>Anexo B.</b> Interfaz de la extensión	70
<b>Anexo C.</b> Introducción a las extensiones	74
<b>Anexo D.</b> Descripción de los equipos	76
<b>Anexo E.</b> Funcionamiento de los equipos	84
<b>Anexo F.</b> Coeficientes de rendimiento	87

## RESUMEN

### TÍTULO:

**DESARROLLO DE UN MÓDULO PARA LA SIMULACIÓN DE DIGESTORES ANAEROBIOS ACOPLADO AL SIMULADOR HYSYS 3.1 \***

### AUTORES:

Mario Andrés Hernández Pardo.

Hector Javier Luna Wandurraga. \*\*

### PALABRAS CLAVES:

Digestión Anaerobia, Modelos Cinéticos, Simulación, HYSYS, Estado Estacionario.

### DESCRIPCIÓN:

La digestión anaerobia es un proceso complejo en el cual intervienen una serie de reacciones biológicas y fisicoquímicas para la producción de biogás ( $\text{CH}_4 - \text{CO}_2$ ), pero su trabajo experimental es muy costoso debido a los largos tiempos de retención hidráulicos, por lo que se ha recurrido al estudio del modelado y la simulación, desarrollando un módulo para la simulación en estado estable de digestores anaerobios acoplados al simulador HYSYS 3.1, con el fin de predecir el comportamiento microbiano a partir de diversos modelos cinéticos: Monod, Grau, Moser.

Se conformó un modelo teórico basado en modelos seleccionados de la literatura, se estableció el modelo matemático regido por los balances de materia, se desarrolló el módulo a través de un código fuente elaborado en Visual Basic 6.0 y se acopló a las bases de datos y métodos de cálculo del simulador logrando vincular el módulo a las operaciones existentes en HYSYS 3.1 y reportando las tendencias esperadas según la literatura.

\* Proyecto de Grado.

\*\* Facultad de Ingenierías Físico-químicas, Escuela de Ingeniería Química, Ing. Edgar Fernando Castillo.

## SUMMARY

### TITLE:

Development of a model for simulation of anaerobic digester coupled to the simulator HYSYS 3.1 \*

### AUTHORS:

Mario Andrés Hernández Pardo.

Hector Javier Luna Wandurraga. \*\*

### KEYWORDS:

Anaerobic Digestion, Kinetics Models, Simulation, HYSYS, Steady State.

### DESCRIPTION:

The anaerobic digestion is a complex process in which a series of biological and physiochemical reactions intervene for the production of  $\text{CH}_4 - \text{CO}_2$ , but its experimental work is very expensive due to the long hydraulic times of retention, for what has been appealed to the study of the modeling and simulation, developing a module for the simulation in steady state of anaerobic digesters coupled to the simulator HYSYS 3.1, with the purpose of predicting the microbial behavior starting from diverse kinetic models: Monod, Grau, Moser.

A theoretical model was conformed based on selected models of the literature, the mathematical pattern governed by the matter balances was settled down, it was developed the module through a code source elaborated in Visual Basic 6.0 and it was coupled to the databases and methods of calculation of the simulator being able to link the module to the existent operations in HYSYS 3.1 and reporting the prospective tendencies according to the literature.

\* Degree Project.

\*\* Physical-chemical Engineer Faculty, Chemical Engineering, Eng. Edgar Fernando Castillo.

## INTRODUCCION

En la actualidad el crecimiento de la población y sus necesidades conlleva a la producción de una mayor cantidad de materiales de desecho entre los cuales están los gases emitidos, las aguas residuales, lodos y residuos sólidos, entre otros. Estos desechos deben ser tratados para lograr el sostenimiento con el medio ambiente, por esto se llevan a cabo numerosas investigaciones sobre los procesos de tratamiento de residuos. Uno de estos tratamientos es la digestión anaerobia el cual es uno de los principales procesos usados para la estabilización de lodos, el tratamiento de estiércol, aguas residuales, aguas industriales y la fracción orgánica de residuos sólidos municipales. Este proceso convierte la materia orgánica en metano y dióxido de carbono por medio de un proceso biológico, su ventaja comparado con otros procesos de tratamiento como el proceso aerobio es que produce una menor cantidad de lodo con un requerimiento de energía y nutrientes mas bajo, además del aprovechamiento del biogás que es usado como fuente de energía.

La ejecución de este tratamiento requiere de estudios previos, pero debido a los largos tiempos de retención que requiere el proceso y los elevados costos de materiales e instrumentación no se pueden obtener abundantes datos de laboratorio por lo que se ha recurrido al estudio del modelamiento matemático y la simulación.

Durante los últimos 35 años se han desarrollado diversos modelos, donde los primeros estudios se centraron en la descripción de la etapa final de la digestión anaerobia, la metanogénesis, que fue considerado como el paso más importante del proceso global. Estos modelos fueron muy simples y consistieron de un número limitado de ecuaciones. Hoy día se tiene una gran

diversidad de modelos que describen dos o más etapas y además incluyen cinéticas de inhibición, cálculo del pH y la dinámica de la fase gaseosa.

En los últimos años el modelamiento matemático de procesos de tratamiento de residuos ha sido aceptado como una herramienta práctica de ingeniería y son ampliamente usados como consulta para compañías, agencias de reglamentación ambiental, para el diseño de plantas, operación y control de las mismas, además están tomando una trascendencia vital en las universidades del mundo entero para la capacitación de sus estudiantes.

El desarrollo de un módulo que trabaje las operaciones de digestión anaerobia, las cuales no se encuentran disponibles en el software comercial, es un paso para realizar aproximaciones del proceso para la puesta en marcha de experimentos. El módulo puede potencializarse a través de su integración al ambiente del simulador HYSYS 3.1, facilitando la simulación del proceso de digestión anaerobia ya que HYSYS brinda paquetes de propiedades y la capacidad de disponer de las diferentes operaciones unitarias existentes en el simulador para integrar los digestores a procesos que involucren el tratamiento y aprovechamiento de los subproductos del proceso.

La metodología para la realización del módulo se basó en una amplia revisión de la literatura, posteriormente se constituyó el modelo del proceso y el respectivo desarrollo del módulo, la última etapa que se realizó fue el análisis de sensibilidad para mostrar que las extensiones cumplen con las tendencias descritas en la literatura.

## 1. FUNDAMENTOS DE LA DIGESTIÓN ANAEROBIA

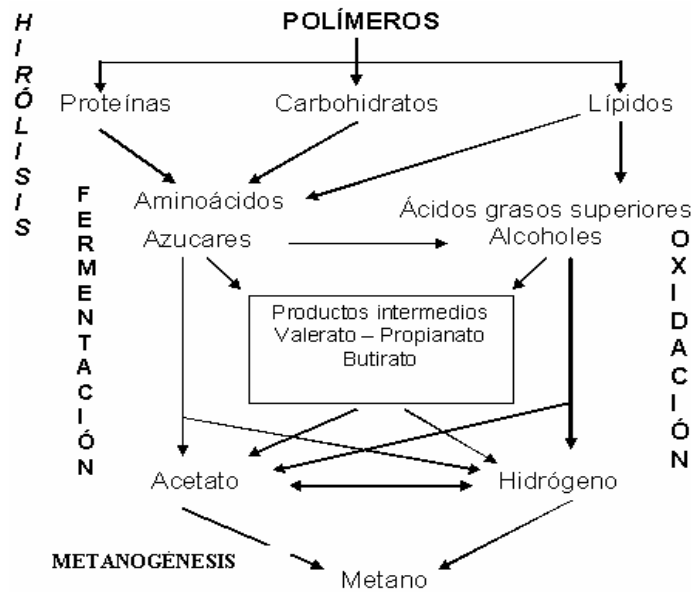
Los fundamentos de la digestión anaerobia comprenden las etapas del proceso, la estequiometría, la cinética microbiana, los modelos de crecimiento e inhibición de los microorganismos, los factores que afectan el proceso y los tipos de digestores anaerobios.

El proceso de digestión anaerobia es un proceso biológico natural en el que una comunidad entrelazada de bacterias cooperan para formar una fermentación estable, autorregulada, que convierte la materia orgánica residual en una mezcla de metano y dióxido de carbono. La digestión anaerobia ha sido descrita como un proceso de múltiples etapas o subprocesos donde se llevan a cabo un grupo de reacciones en serie y en paralelo de las cuales se han identificado siete etapas<sup>1</sup> como se muestra en la figura 1.

1. Hidrólisis del material orgánico particulado (carbohidratos, proteínas y lípidos).
2. Fermentación o acidogénesis de aminoácidos y azúcares.
3. Oxidación anaerobia o acetogénesis de ácidos grasos de cadena larga y alcoholes.
4. Oxidación anaerobia o acetogénesis de productos intermedios como ácidos grasos de cadena corta (excepto el ácido acético).
5. Homoacetogénesis.
6. Metanogénesis acetoclástica.
7. Producción de metano por reducción de hidrógeno y de dióxido de carbono.

---

<sup>1</sup> PAVLOSTATHIS, S.G y Giraldo-Gomez, E. (1991). Kinetics of anaerobic treatment. Water Science and Technology 24: 35-59.



**Figura 1.** Representación esquemática de la digestión anaerobia.

## 1.1 ETAPAS DE LA DIGESTION ANAEROBIA

La digestión anaerobia como se explicó anteriormente ha sido descrita por varios autores, los cuales han definido diversas rutas para este proceso, sin embargo estas rutas generalmente tienen cuatro etapas establecidas.

**1.1.1 Hidrólisis de biopolímeros.** La hidrólisis es la primera etapa de la digestión anaerobia, también llamada depolimerización<sup>2</sup>. Esta etapa incluye dos procesos, la solubilización del material particulado insoluble y la descomposición biológica de polímeros orgánicos a monómeros o dímeros, los cuales pasan a través de la membrana celular. La hidrólisis de polímeros orgánicos es usualmente llevada a cabo por enzimas extracelulares llamadas hidrolasas excretadas por las bacterias fermentativas. La etapa hidrolítica

<sup>2</sup> PALMISANO, A. y Barlaz, M. Anaerobic Digestion of Municipal Solid Wastes. (2003, Diciembre).

puede ser la etapa limitante de la velocidad del proceso global, sobre todo tratando residuos con alto contenido en sólidos. Incluso en casos donde la fase acidogénica o metanogénica son consideradas como pasos limitantes, la hidrólisis puede afectar el conjunto del proceso.

La hidrólisis es descrita por el modelo cinético de primer orden y por el de Contois<sup>3</sup> pero se ha observado que este tiende a seguir la cinética de primer orden por lo que se puede afirmar que la hidrólisis es relativamente independiente de la concentración de microorganismos, incluso a concentraciones muy bajas de estos. Esta independencia puede ocurrir debido a que enzimas extracelulares, no las bacterias, llevan a cabo las reacciones de hidrólisis. La hidrólisis de cada tipo de compuesto se realiza por diferentes grupos enzimáticos. En la tabla 1 se muestran algunos valores de la tasa de depolimerización reportados por Palmisano (2003).

**Tabla 1.** Tasa de depolimerización de biopolímeros (mesofílico).

Biopolímero	Tasa de depolimerización (días <sup>-1</sup> )
Lípidos	0.4 - 0.6 (ésteres de AGV) 0.12 - 1.7 (grasas) 0.08 (lípidos)
Proteínas	0.02 - 0.03
Celulosa	0.04 - 0.13
Hemicelulosa	0.54

Fuente: Palmisano 2003

**1.1.1.1 Carbohidratos.** Los principales componentes de este grupo son la lignina, la hemicelulosa y la celulosa, la cual ha sido objeto de varios estudios. La lignina es un material altamente refractario a la degradación anaerobia, afectando también a la biodegradabilidad de la celulosa, hemicelulosa y de otros polímeros, convirtiéndose su degradación en el proceso limitante de la velocidad de hidrólisis y por tanto de la degradación anaerobia de determinados sustratos. Los productos de la hidrólisis de la

<sup>3</sup> RITTMANN, McCarty. Biotecnología del medio ambiente. 2001

celulosa son la celobiosa (dímero) y la glucosa, mientras que la hemicelulosa hidroliza a pentosas y hexosas. En la tabla 2 se presentan algunos datos reportados en la literatura de las constantes hidrolíticas tomando en cuenta el modelo cinético de primer orden.

**Tabla 2.** Constantes hidrolíticas ( $d^{-1}$ ) para la hidrólisis de la celulosa en función de la temperatura y el tiempo de retención de sólidos.

Temperatura (°C)	Tiempo de retención de sólidos ( $d^{-1}$ )				
	5	10	15	30	60
35	1.95	1.21	0.62	0.38	0.21
25	0.29	0.27	0.27	0.34	0.16
20	0.09	0.14	0.13	0.14	0.10
15	-	0.05	0.03	0.10	0.08

Fuente: Gavala 2003

**1.1.1.2 Proteínas.** En la digestión anaerobia las proteínas sirven como fuente de carbono y energía para el crecimiento bacterial y adicionalmente el amoníaco que se desprende en la hidrólisis de proteínas sirve como la principal fuente de nitrógeno para el crecimiento de la biomasa. La hidrólisis de proteínas es realizada por enzimas extracelulares (proteasas) en polipéptidos, aminoácidos, amoníaco y dióxido de carbono y es más lenta que la hidrólisis de carbohidratos. Algunos valores cinéticos (primer orden) de las principales proteínas son mostrados en la tabla 3.

**Tabla 3.** Valores de la constante de hidrólisis para diferentes proteínas.

Sustrato	$K_h$ ( $d^{-1}$ )
Caseína	0.35
Gelatina	0.60
P. de maíz	0.04

Fuente: Gavala 2003

**1.1.1.3 Lípidos.** La degradación de lípidos en ambientes anaerobios consiste en una ruptura inicial de las grasas por un grupo de enzimas

hidrolíticas (lipasas) en los correspondientes ácidos grasos de cadena larga y moléculas de glicerol o galactasa. Una molécula de fosfolípidos produce un equivalente de ácido fosfórico, uno de glicerol y dos de ácidos grasos.

**1.1.2 Acidogénesis.** La acidogénesis es la etapa en donde la materia orgánica disuelta es biodegradada a ácidos grasos volátiles (ácido acético, propiónico, butírico), hidrógeno, dióxido de carbono y alcoholes por una población bacteriana heterogénea. La especie dominante es la bacteria acidogénica aunque se han reportado pequeñas poblaciones de protozoos, y hongos. Estas bacterias son consideradas de crecimiento rápido, tiempo de duplicación mínimo de 30 minutos<sup>4</sup> y la reacción preferida por estas bacterias es la que conduce a ácido acético; las otras reacciones son las respuestas de las bacterias a la acumulación de hidrógeno durante las perturbaciones de carga al sistema.

**1.1.3 Acetogénesis.** En general existen dos mecanismos diferentes de acetogénesis; la acetogénesis de hidrogenación que produce ácido acético como un solo producto final de la fermentación de hexosa o de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>, y la acetogénesis de deshidrogenación que es la que normalmente reportan los investigadores. Esta convierte los ácidos grasos de cadena corta y de cadena larga a ácido acético por un grupo de bacterias acetogénicas. El grupo bacteriano de esta etapa tiene un crecimiento relativamente lento, tiempo de duplicación mínimo de 1.5 a 4 días<sup>5</sup>. Las reacciones que producen son muy complejas energéticamente y se interrumpen fácilmente por acumulación de gas hidrógeno disuelto en el medio. La etapa acidogénica es normalmente representada por el modelo cinético de Monod.

---

<sup>4</sup> MUSSATI, M, Aguirre P y Scenna N (1998). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. Capítulo XVIII, 697.

<sup>5</sup> MUSSATI, Op. Cit., p. 698.

**1.1.4 Metanogénesis.** Existen dos grupos de bacterias metanogénicas, las denominadas acetoclásticas y las que utilizan el hidrógeno (hidrogenofílicas). Las bacterias acetoclásticas convierten el ácido acético en dióxido de carbono y metano, estas se desarrollan muy lentamente con un tiempo de duplicación mínimo de 2-3 días e influyen apreciablemente en el pH del sistema por eliminación de ácido acético y formación de dióxido de carbono, además son responsables de la mayoría del metano producido.

Las bacterias metanogénicas que utilizan hidrógeno (hidrogenofílicas) se desarrollan rápidamente con un tiempo de duplicación mínimo de 6 horas, estas actúan convirtiendo el hidrógeno y el dióxido de carbono a metano. Estas controlan el potencial redox del proceso, las trazas de hidrógeno que quedan en el medio regulan la velocidad total de producción de ácidos por las bacterias acidogénicas, y la composición de la mezcla formada. El hidrógeno también controla la velocidad a la cual los ácidos propiónico y butírico son convertidos a ácido acético; en definitiva, regulan la formación de ácidos volátiles.

## **1.2 RELACIONES ESTEQUIOMÉTRICAS PARA LA DIGESTIÓN ANAEROBIA**

La estequiometría básica ha sido estudiada por varios autores, entre los cuales pueden citarse a Wolfe (1979) y Smith (1980)<sup>6</sup>, quienes se basaron en la fórmula empírica para la biomasa ( $C_5H_7O_2N$ ) determinada por Loehr (1974), esta es una de las primeras fórmulas empíricas que se utilizaron en el equilibrio de las reacciones biológicas, porque representa los nutrientes básicos para el crecimiento de la biomasa, sin embargo, la proporción relativa de elementos presentes realmente en la célula depende de las

---

<sup>6</sup> MUSSATI, M, Aguirre P y Scenna N (1998). Modeling of real biological reactors for the treatment of complex substrates. Dynamic simulation. Computers Chem. Engng. 22: S723-S726.

características de los microorganismos , de los sustratos empleados para obtener energía y de la disponibilidad de otros nutrientes precisos para el crecimiento microbiano.

Por otra parte, Hill y Barth (1974) realizaron análisis en residuos de cerdos para determinar su composición química empírica, obteniendo la fórmula  $C_6H_{13}NO_5$ . Análisis similares efectuados en suero de lechería, carne y residuos de aves permitieron concluir que solamente cambian las relaciones nitrógeno/oxígeno, ya que las relaciones carbono/hidrógeno son similares.

### 1.3 CINÉTICA MICROBIANA

La cinética microbiana juega un papel importante en la degradación de la materia orgánica ya que por medio de simples expresiones describe la actividad de los microorganismos tales como el crecimiento, el mantenimiento, el metabolismo endógeno y la muerte.

**1.3.1 Cinética de crecimiento.** El crecimiento celular generalmente involucra la respiración y conversión de sustrato a productos, lo cual libera energía en forma de adenosin 5-trifosfato (ATP). La energía liberada de las reacciones catabólicas es utilizada para la síntesis de nuevas células y para el mantenimiento celular (anabolismo).

*Catabolismo:* sustrato  $\rightarrow$  Producto Microbiano + Energía

*Anabolismo:* sustrato + Energía  $\rightarrow$  Microorganismos

*Metabolismo:* sustrato  $\rightarrow$  Producto Microbiano + Microorganismos

En general el metabolismo de los microorganismos es asociado con la producción de ATP. La relación de la masa de ATP producida por la masa de sustrato consumida es definida como el coeficiente de rendimiento de ATP,

de acuerdo con esto, el coeficiente de rendimiento de biomasa y el coeficiente de rendimiento de producto se expresan como<sup>7</sup>:

Coeficiente de rendimiento de biomasa:  $Y_{X/S} = \frac{\Delta X}{\Delta S}$

Coeficiente de rendimiento de producto:  $Y_{P/S} = \frac{\Delta P}{\Delta S}$

Donde:  $X$  = Concentración de biomasa ( $M_x L^{-3}$ )  
 $S$  = Concentración de sustrato ( $M_s L^{-3}$ )  
 $P$  = Concentración de producto ( $M_p L^{-3}$ )

El crecimiento bacterial es frecuentemente descrito por una serie de expresiones matemáticas de acuerdo con:

$$r_x = \mu(S, pH, T, S_{n1}, S_{n2}, \dots, S_{ni}) * X$$

donde:  $r_x$  = Velocidad crecimiento de biomasa ( $M_x L^{-3} T^{-1}$ )  
 $\mu$  = Velocidad específica de crecimiento debida a síntesis ( $T^{-1}$ )  
 $S_{in}$  = Concentración del inhibidor ( $M_i L^{-3}$ )

**1.3.2 Mantenimiento.** Los microorganismos requieren energía para mantener las estructuras existentes y para los procesos tales como movilidad, regulación osmótica y pérdida de calor. El mantenimiento representa, cuantitativamente, la masa de sustrato oxidada por unidad de masa celular y por unidad de tiempo, que suministra la energía necesaria. El mantenimiento disminuye el rendimiento total de células a partir del sustrato, se expresa:

$$r_m = k_m * X$$

donde :  $k_m$  = Coeficiente de mantenimiento ( $M_s M_x^{-1} * T^{-1}$ )

---

<sup>7</sup> GAVALA, H y Angelidaki I (2003). Kinetics and modeling of aerobic digestion process. *Advances Biochemical Engineering/Biotechnology* 81: 58 – 93.

**1.3.3 Metabolismo endógeno.** Un rendimiento celular observado menor al rendimiento teórico se debe al metabolismo endógeno; esto es, la degradación de componentes celulares.

El término de metabolismo endógeno se incluye en el balance de materia de la biomasa, y esencialmente refleja el decaimiento de la biomasa. Su expresión es:

$$r_E = k_E * X$$

donde:  $k_E$  = Coeficiente de metabolismo endógeno ( $T^{-1}$ )

**1.3.4 Muerte de microorganismos.** La cinética de muerte debido al agotamiento del sustrato se considera de primer orden con respecto a la concentración celular:

$$r_D = k_D * X$$

donde:  $k_D$  = Coeficiente de muerte específico ( $T^{-1}$ )

## 1.4 MODELOS CINÉTICOS PARA LA DIGESTIÓN ANAEROBIA

La manera de representar la velocidad específica de crecimiento de los compuestos que participan en la digestión anaerobia es a través de modelos cinéticos los cuales se han estudiado ampliamente, presentándose una gran variedad que describen este fenómeno.

Después de una amplia revisión bibliográfica se encontró una gama de modelos cinéticos los cuales se presentan a continuación, resaltando el modelo cinético de Monod por ser el más ampliamente usado en el análisis cinético y diseño de reactores.

**1.4.1 Modelo de Monod.** Jaques Monod (1942), estudió el efecto de la composición de un medio de cultivo libre de sustancias inhibitorias sobre la velocidad específica de crecimiento expresada así:

$$\mu = \mu_{\max} * \frac{S}{K_s + S} \quad (1)$$

donde:  $\mu_{\max}$  = Velocidad máxima de crecimiento específico ( $T^{-1}$ )

$K_s$  = Constante de saturación de Monod ( $M_s L^{-3}$ )

Esta ecuación es una representación matemática adecuada para una transición suave desde una relación de primer orden (en S) a baja concentración, a una relación de orden cero (en S) a alta concentración.

La ecuación puede ser considerada como la combinación de dos expresiones que describen el comportamiento a bajas y altas concentraciones:

$$\mu = \mu_{\max} \quad \text{para } S \gg K_s \quad (2)$$

$$\mu = \frac{\mu_{\max}}{K_s} * S \quad \text{para } S \ll K_s \quad (3)$$

**1.4.2 Modelos alternativos.** Las ecuaciones presentadas a continuación corresponden a modelos cinéticos no estructurados, considerados como una buena aproximación cuando la composición celular es independiente del tiempo, cuando el crecimiento es balanceado, cuando la composición celular no es importante a escala industrial o cuando no se presenta inhibición.

*Modelo de primer Orden :*

$$\mu = \frac{k * S}{S_o + S} \quad (4)$$

donde:  $K$  = constante de primer orden ( $T^{-1}$ )  
 $S_0$  = Concentración de sustrato inicial ( $M_sL^{-3}$ )

*Modelo de Grau (1975):*

$$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{S_0} \quad (5)$$

donde:  $\mu_{\max}$  = Velocidad máxima de crecimiento específico ( $T^{-1}$ ).

*Modelo de Moser (1958)*<sup>8</sup>: Moser ajusta el modelo cinético de Monod por medio de un parámetro empírico que cuando toma el valor de 1 se convierte en la ecuación de Monod

$$\mu = \mu_{\max} * \frac{S^n}{K_s + S^n} \quad (6)$$

donde:  $\gamma$  = Constante empírica adimensional.

*Modelo de Contois:* El modelo propuesto por Contois, (1959), se aplica en sistemas donde prevalecen altas concentraciones de biomasa cuyo crecimiento se acompaña por la producción de metabolitos o inhibidores tóxicos:

$$\mu = \mu_{\max} * \frac{S}{B * X + S} \quad (7)$$

donde:  $B$  = Constante ( $M_sM_x^{-1}$ ).

*Modelo de Tessier (1936):* Tessier propuso una función exponencial representada en la siguiente ecuación

$$\mu = \mu_{\max} * \left(1 - e^{-S/K}\right) \quad (8)$$

---

<sup>8</sup> BURGOS, C. y Pradilla, M. Biorreactores. Versión 2.0.0. Universidad Nacional de Colombia. Sede Bogotá. 1999.

*Modelo de Konak:* El modelo propuesto por Konak (1974), se expresa mediante la ecuación

$$\frac{d\mu}{dC_s} = k(\mu_{\max} - \mu)^p \quad (9)$$

donde:  $k = \frac{1}{\mu_{\max} * K_s}$        $p =$  Constante empírica.

Konak demostró que esta ecuación se convierte en la ecuación de Monod para  $p = 2$ , y en la ecuación de Tessier para  $p = 1$ .

*Modelo de Kargi y Shuler :* El modelo propuesto por Kargi y Shuler (1979), es una generalización de los modelos presentados anteriormente

$$\frac{d\left(\frac{\mu_x}{\mu_{\max}}\right)}{dC_s} = K \left(\frac{\mu_x}{\mu_{\max}}\right)^m \left(1 - \frac{\mu_x}{\mu_{\max}}\right)^p \quad (10)$$

## 1.5 MODELOS DE INHIBICIÓN

El efecto de los componentes tóxicos que afectan el proceso de la digestión anaerobia, tienen diversas representaciones matemáticas de acuerdo al tipo de componente y la etapa afectada, los modelos más utilizados que son reportados en la literatura se presentan a continuación.

**1.5.1 Modelo de inhibición propuesto por Haldane.** El aporte de Haldane es que modifica el modelo de Monod incluyendo el efecto del componente inhibidor o tóxico que se refleja en la concentración de este y la constante respectiva, como un modelo de competencia entre el sustrato y el inhibidor.

$$\mu = \mu_{\max} * \frac{1}{1 + \frac{K_s}{S} + \frac{I}{K_i}} \quad (11)$$

donde:  $K_I$  = Constante de inhibición ( $M_S L^{-3}$ ).  
 $I$  = Concentración del inhibidor ( $M_S L^{-3}$ ).

**1.5.2 Modelo de inhibición del tipo no competitivo.** La forma más habitual de representar esta expresión es mediante la aproximación multiplicativa de Monod.

$$\mu = \mu_{\max} * \frac{S}{K_S + S} * \frac{K_I}{K_I + I} \quad (12)$$

donde:  $K_I$  = Constante de inhibición ( $M_S L^{-3}$ )  
 $I$  = Concentración del inhibidor ( $M_S L^{-3}$ )

Los modelos cinéticos mostrados presentan la característica de la dependencia de la concentración inicial del sustrato ( $S_0$ ) (ecuación 4), de la concentración de biomasa ( $X$ ) (ecuación 7) o ser independiente de estas dos variables como el modelo cinético de Monod y es el motivo por el cual es uno de los más utilizados, además de su buena aproximación al fenómeno cinético.

**1.5.3 Modelo de inhibición de pH.** Todos los grupos bacterianos tienen un pH óptimo de crecimiento, por lo que debe computarse su efecto cuando las condiciones ambientales determinan niveles de concentración de protones alejados de aquellos niveles óptimos, este efecto fue descrito por una función de pH de Michaelis, normalizada para dar un valor de 1.0 cuando el pH de l sistema es el óptimo<sup>9</sup>.

$$f(pH) = \frac{1 + 2 * 10^{0.5 * (pk_1 - pk_n)}}{1 + 10^{(pH - pk_n)} + 10^{(pk_1 - pH)}} \quad (13)$$

donde:

---

<sup>9</sup> ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. (1993). A mathematical model for dynamic imulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineerig* 42: 159-166.

pKl y pKh son los valores del pH para los cuales la velocidad de crecimiento específica se reduce al 50% de su valor sin inhibición.

## 1.6 DIGESTORES ANAEROBIOS

Un digestor anaerobio es un depósito en el que se producen una serie de reacciones biológicas llevadas a cabo por los microorganismos o enzimas que se encuentran dentro del mismo. Los digestores anaerobios se emplean principalmente para reducir la concentración de los contaminantes presentes en las aguas residuales, afluentes de residuos sólidos, hasta que se consiguen unos niveles aceptables<sup>10</sup>.

**Tabla 4.** Nivel de contaminantes en un digestor anaerobio

INDICADOR	Concentración inicial (mg/L)	Concentración final (mg/L)
DBO	100-250	5-15
DQPO	200-700	15-75
P	6-10	0.2-0.6
N	20-30	2-5
SS	100-400	10-25

Fuente: Levin 1997

**1.6.1 Tipos de digestores anaerobios.** Los digestores se clasifican de acuerdo al tipo de cultivo, en digestores de crecimiento en suspensión y cultivos fijos. Los regímenes de flujo pueden ser similares en ambos casos, en ocasiones pueden usarse digestores en serie como una combinación de los dos tipos. A fin de escoger el digestor óptimo, el ingeniero tiene que entender la cinética y las propiedades fundamentales en los diferentes tipos de digestores. Los factores que influyen en la elección de los digestores

<sup>10</sup> LEVIN, M. y Gealf, M. Biotratamiento de Residuos Tóxicos y Peligrosos: Selección, Estimación, Modificación de Organismos y Aplicación. McGrawHill. 1997.

pueden ser, las características físicas y químicas del residuo a utilizar, la concentración de los componentes tóxicos, la eficiencia del tratamiento y la fiabilidad del sistema requerido, las condiciones climáticas bajo las cuales va a operar, la experiencia y profesionalidad de quienes van a trabajar en la instalación, los costos y el tiempo determinado para la construcción y operación de las posibles configuraciones del digestor.

A continuación se procede a definir y dar aspectos de tres clases de digestores usados frecuentemente.

**1.6.1.1 Digestor CSTR.** La geometría y el funcionamiento de los digestores de tanque agitado son similares a la de los reactores químicos de este tipo, con la diferencia de que los esfuerzos cortantes generados por la agitación deben ser considerablemente disminuidos para evitar el daño de los biocatalizadores. En ellos, el líquido o corriente de lodo se introduce continuamente y el contenido de líquidos es continuamente eliminado del reactor. En condiciones normales de operación pueden ser o no introducidos en el digestor cultivos microbianos. Si se actúa adecuadamente, los microorganismos que crecen en el digestor sustituyen continuamente a los que son eliminados del reactor en el efluente. La característica básica del CSTR ideal es que las concentraciones de sustrato y microorganismos son las mismas en todo el reactor. Además de ello, las concentraciones que abandonan el digestor en el efluente son las mismas que en todo el digestor. Esta uniformidad en la concentración hace el análisis del CSTR comparativamente simple.

**1.6.1.2 Digestor UASB.** El concepto de un digestor de flujo ascendente y manto de lodos (UASB) es establecer un manto de lodos en el fondo del reactor, en el cual se llevan acabo todos los procesos biológicos. Este manto de lodos es básicamente formado por la acumulación de los sólidos suspendidos entrantes y los grupos bacterianos.

La biomasa que en ellos se desarrolla adopta una estructura característica denominada lodo granular. La retención de lodo activo, granular o flóculo, dentro del reactor UASB facilita el buen desempeño del tratamiento para una carga orgánica alta. La turbulencia causada por la corriente de entrada y la producción de biogás provee un buen contacto de la biomasa con la corriente a tratar, favoreciendo la remoción de la materia orgánica.

Los reactores UASB pueden ser considerados divididos en tres compartimientos: un manto de lodos, una zona de líquido sobrenadante y un sedimentador. Los dos primeros se consideran completamente mezclados, mientras que el último se toma como un sector de flujo pistón. Los cortocircuitos, los flujos de retorno y los espacios muertos pueden ser considerados para describir el sistema con más precisión. El comportamiento hidrodinámico y el modelo de mezclado del lodo son interdependientes e influyen el rendimiento del proceso. La velocidad ascensional, el ascenso de las burbujas de biogás y la distribución de la corriente de entrada en la base del reactor son los principales factores que afectan el flujo del líquido y el modelo de mezclado. Este modelo puede ser determinado mediante técnicas de estímulo-respuesta, realizando ensayos de distribución del tiempo de residencia con trazadores inertes.

**1.6.1.3 Digestor PFR.** El digestor de flujo pistón (PFR) es el extremo opuesto del digestor de mezcla completa en el cual, el fluido se desplaza a lo largo de un tubo o canal de forma que se presenta un mezclado imperceptible en la dirección del flujo (dirección axial), pero hay una mezcla bastante buena en la dirección radial. El reactor de flujo en pistón ofrece un grado de conversión de sustrato mayor que el de un reactor de tanque agitado de igual volumen (igual tiempo de residencia), porque la velocidad de reacción en un reactor de tanque agitado es menor debido a que la concentración de sustrato alcanza inmediatamente el valor de salida y la

velocidad depende de este valor, mientras en el PFR la concentración de sustrato desciende a lo largo de la dirección axial.

## **1.7 FACTORES QUE AFECTAN LA DIGESTIÓN ANAEROBIA**

La digestión anaerobia al ser un proceso que involucra varias variables es un sistema de interacciones complejas lo que lo hace susceptible de sufrir alteraciones por la variación de condiciones internas y externas. A continuación se presentan las variables más representativas que intervienen en el proceso de digestión anaerobia.

**1.7.1 Temperatura.** La temperatura afecta directamente la velocidad de las reacciones biológicas, influenciando la actividad metabólica de los microorganismos que intervienen. A su vez, tiene un efecto marcado sobre la velocidad de transferencia de gases, la viscosidad, la tensión superficial y sobre la sedimentación de algunos sólidos biológicos. La eficiencia de los procesos anaerobios es altamente dependiente de la temperatura del reactor, este proceso se lleva a cabo en dos intervalos de temperatura: el mesofílico que va de 25 – 40 °C y el termofílico de 45 – 60°C. La temperatura no sólo afecta la velocidad del proceso, sino también el nivel de degradación alcanzado, o biodegradabilidad final. A bajas temperaturas, más materia orgánica permanece sin degradar debido a que la hidrólisis de sólidos volátiles es demasiado lenta. Sin embargo, si esos sólidos son retenidos en el reactor, separados de la fase líquida, pueden ser degradados en un digestor adicional o en el mismo reactor cuando la temperatura sube nuevamente.

**1.7.2 pH.** El proceso de digestión anaerobia es relativamente limitado a un estrecho intervalo de pH entre 6.0 – 8.5<sup>11</sup>. Un valor de pH fuera de este intervalo puede llevar a un desequilibrio del proceso. Cada grupo bacteriano que contribuye al proceso de la digestión anaerobia tiene un pH óptimo y puede crecer en un rango específico. La metanogénesis y la acetogénesis tienen un pH óptimo aproximado a 7.0 mientras la acidogénesis tiene un pH óptimo bajo (6.0) y el de la metanogénesis es de 6.6. En un reactor anaerobio una inestabilidad puede llevar a una acumulación de ácidos grasos volátiles, los cuales causan una caída en el pH (acidificación). Sin embargo, no siempre la acumulación de ácidos grasos volátiles se manifiesta como una caída del pH debido a la capacidad buffer que tienen cierto tipo de residuos.

**1.7.3 Toxicidad.** Un gran número de compuestos son tóxicos para los microorganismos anaerobios. Las bacterias metanogénicas son comúnmente las más sensibles a la toxicidad de microorganismos en la digestión anaerobia. Sin embargo, el proceso puede aclimatarse para tolerar concentraciones más altas del componente tóxico, después de un período de adaptación, Gavala (2001) estudió la aclimatación de varios sustratos. El inhibidor más común para el proceso anaerobio es el amoníaco. Los diversos sustratos contienen amoníaco en concentraciones tóxicas y adicional producido por la hidrólisis de las proteínas, esto causa un conflicto, el nivel de amoníaco depende de la temperatura y el pH, que determina el grado de ionización y relaciona la concentración de amoníaco libre que es la causante de la inhibición del proceso. Bhattacharya y Parkin encontraron que la concentración máxima tolerable de amoníaco libre es de 55 mg-N/L, pero Angelidaki y Ahring (2003) encontraron que el proceso de producción de biogás puede ser adaptado para tolerar una concentración de amoníaco libre de 800 mg-N/L.

---

<sup>11</sup> ANGELIDAKI, I, Ahring B. 2003. Applications of the Anaerobic Digestion Process Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology. 82 : 1 – 33.

## 2. MODELAMIENTO DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA

La estrategia del modelamiento del proceso de digestión anaerobia consiste en el desarrollo de un modelo conceptual, un modelo matemático basado en los balances de materia y la construcción de un módulo en el ambiente del simulador HYSYS para los dos tipos de digestores anaerobios seleccionados.

La digestión anaerobia es un proceso complejo en el cual están involucradas una serie de reacciones biológicas y fisicoquímicas para la producción de biogás ( $\text{CH}_4$  y  $\text{CO}_2$ ), pero el estudio de este proceso a nivel de laboratorio y planta piloto es muy tedioso y costoso debido a los largos tiempos de retención hidráulico empleados lo que no permite obtener abundantes datos experimentales, razón por la cual se ha recurrido a estudios de modelado y simulación que son ciertamente necesarios y complementarios a los experimentales. Además contribuirá al diseño, operación, optimización y control del proceso<sup>12</sup>.

Para facilitar el estudio de los numerosos modelos reportados en la literatura Gavala<sup>13</sup> (2003) sugirió clasificarlos según su parámetro clave, de los cuales se diferencian cinco grupos (Ver anexo A). Debido a esta gran variedad de modelos se estableció un modelo unificado presentado en 1997 en Sendai (Japón) ADM1<sup>14</sup> (Modelo de Digestión Anaerobia N° 1)

---

<sup>12</sup> PIND, P, Angelidaki I, Ahring B. 2003. Monitoring and Control of Anaerobic Reactors Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology. 82 : 137 – 182.

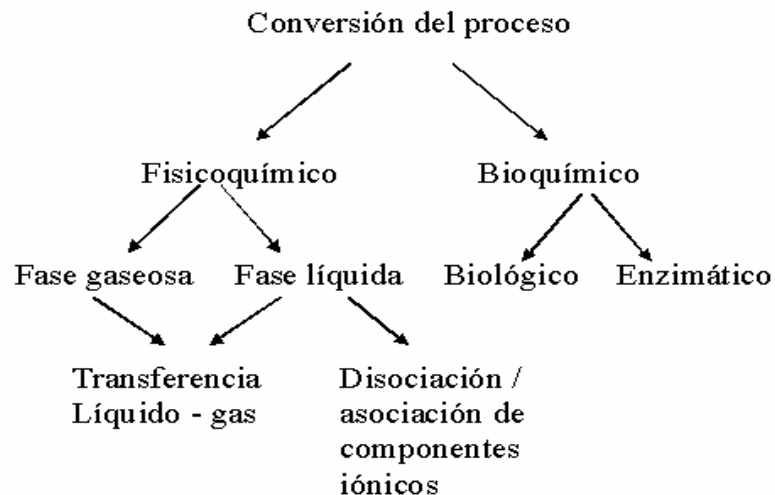
<sup>13</sup> GAVALA, H y Angelidaki I (2003). Kinetics and modeling of aerobic digestion process. Advances Biochemical Engineering/Biotechnology 81: 58 – 93.

<sup>14</sup> BATSTONE, D, Keller, J, Angelidaki, I, Kalyuzhnyi, S, Pavlostathis, S, Rozzi, A. (2002). The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). Water Science and Technology 45: 65-73.

## 2.1 MODELO CONCEPTUAL

El modelo tiene como objetivo predecir el comportamiento microbiano en digestores anaerobios CSTR y UASB a partir de los modelos cinéticos seleccionados mas adelante.

Este modelo fue basado en los modelos propuestos por Angelidaki en 1993<sup>15</sup> y 1999<sup>16</sup> con algunas simplificaciones y cambios en los modelos cinéticos. Los procesos que ocurren en este sistema pueden ser divididos en dos grupos, el fisicoquímico y el biológico como se muestra en la figura 2.



**Figura 2.** Diagrama de conversión del proceso

**2.1.1 Suposiciones del modelo.** Se considera presión constante en la fase gaseosa, volumen de reacción constante y control perfecto de temperatura (proceso isotérmico). Para el cálculo del pH se consideran todas las especies iónicas presentes en el equilibrio, se tiene en cuenta los efectos de la

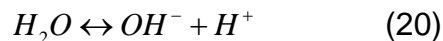
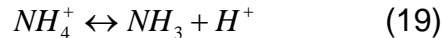
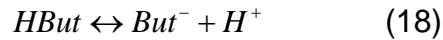
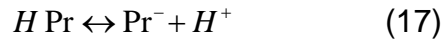
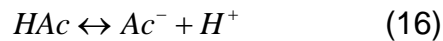
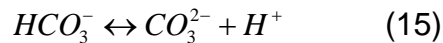
<sup>15</sup> ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. (1993). A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineering* 42: 159-166.

<sup>16</sup>ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. (1999). A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and Bioengineering* 63: 363-372.

transferencia líquido-gas del metano, dióxido de Carbono, ácido sulfhídrico y el agua y no se incluye la transferencia de amoniaco, se incluye la dependencia de las constantes fisicoquímicas (constantes de equilibrio y disociación) y los parámetros biológicos (velocidad específica máxima de crecimiento) con la temperatura y no se consideran las bacterias que utilizan hidrógeno (hidrogenofílicas).

**2.1.2 Proceso fisicoquímico.** Las reacciones fisicoquímicas de este sistema se definen como aquellas donde no participan los microorganismos y que ocurren en el digestor anaerobio.

Las reacciones líquido-líquido, es decir la asociación y disociación de los iones. Las reacciones líquido-líquido para este modelo son:



El intercambio gas-líquido, es decir la transferencia de masa de los componentes presentes en el biogás: metano, dióxido de carbono, agua y ácido sulfhídrico. La transferencia de masa hacia la fase gaseosa se realizó aprovechando la interacción con el simulador HYSYS utilizando uno de sus métodos de cálculo para realizar el flash de la corriente y obtener así la transferencia de masa hacia el gas.

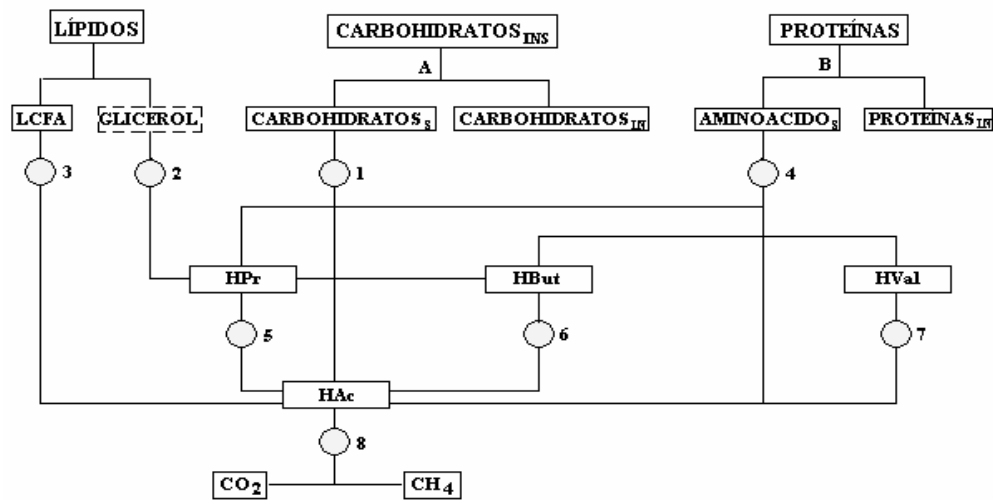
**2.1.3 Proceso biológico.** Este proceso lo componen las reacciones donde participan los grupos bacterianos y las reacciones catalizadas por las enzimas producidas por estos microorganismos. Este modelo incluye dos procesos enzimáticos:

- A. La hidrólisis de carbohidratos insolubles a carbohidratos solubles
- B. La hidrólisis de proteínas a aminoácidos

Además, incluye ocho grupos bacterianos:

1. Las bacterias fermentadoras o acidogénicas que degradan los carbohidratos solubles (glucosa) a ácidos grasos volátiles.
2. Las bacterias lipolíticas que degradan los lípidos a LCFA (ácidos grasos de cadena larga) y glicerol.
3. Las bacterias acetogénicas de LCFA que degradan los LCFA a ácido acético.
4. Las bacterias acidogénicas de aminoácidos que degradan los aminoácidos a AGV
5. Las bacterias acetogénicas del ácido propiónico que degradan el ácido propiónico a ácido acético.
6. Las bacterias acetogénicas del ácido butírico que degradan el ácido butírico a ácido acético.
7. Las bacterias acetogénicas del ácido valérico que degradan el ácido valérico a ácido acético.
8. Las bacterias metanogénicas acetoclásticas que degradan el ácido acético a metano y dióxido de carbono.

El diagrama del proceso biológico se muestra en la figura 3.



**Figura 3.** Diagrama del proceso biológico.

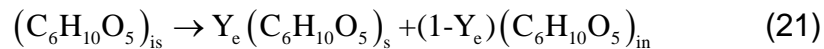
**2.1.3.1 Sustrato.** El sustrato consiste en una mezcla compleja de materia orgánica disuelta y no disuelta compuesta por carbohidratos, lípidos y proteínas, además de compuestos inorgánicos como amoníaco y carbonato, iones y aniones como  $Mg^{+}$ ,  $Ca^{+}$  que juegan un papel importante en la determinación del pH. El contenido de carbohidratos, proteínas y lípidos puede ser determinado por los métodos estándares. La fracción de carbohidratos particulados puede ser estimada por una relación entre sólidos suspendidos y sólidos disueltos. La degradabilidad de los carbohidratos y las proteínas generalmente está entre 50 y 100%, siendo los valores más bajos para los residuos con altos contenidos de fibras o tejidos. Las concentraciones de intermediarios (VFA) pueden determinarse por métodos estándar.

**2.1.3.2 Estequiometría.** La estequiometría definida para el modelo fue basada en la obtenida experimentalmente por Angelidaki<sup>17</sup> y Hill, se describe

<sup>17</sup> ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. (1993). A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineering* 42: 159-166.

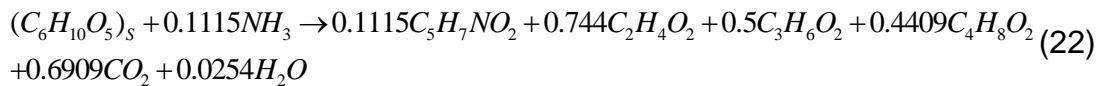
a continuación para todos los compuestos involucrados en el proceso modelado.

**2.1.3.2.1 Carbohidratos.** En el modelo se encuentran como carbohidratos soluble representado por  $(C_6H_{10}O_5)_s$ , insolubles por  $(C_6H_{10}O_5)_{is}$  e inerte por  $(C_6H_{10}O_5)_{in}$ . Los carbohidratos insolubles son hidrolizados enzimáticamente a carbohidratos solubles

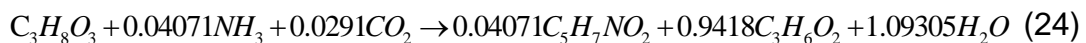
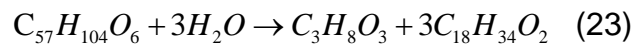


Donde,  $Y_e$  es el coeficiente enzimático.

Los carbohidratos solubles son degradados a AGV por la siguiente ecuación propuesta por Hill:



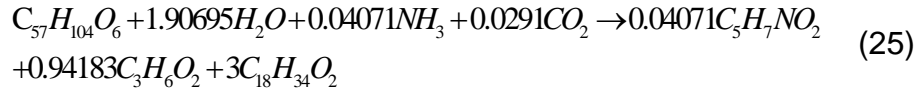
**2.1.3.2.2 Lípidos.** El glicerol trioleato (GTO,  $C_{57}H_{104}O_6$ ) es usado como un modelo de lípido, el oleato ( $C_{18}H_{34}O_2$ ) es el tipo de LCFA más abundante en muchos aceites vegetales. El GTO es convertido a glicerol y oleato por las bacterias acidogénicas del glicerol<sup>18</sup>, más adelante el glicerol es degradado a ácido propiónico<sup>19</sup> (Schauder y Schink, 1989), el cual no es incluido en el modelo cinético por que se asumió que esta reacción tiene lugar instantáneamente como parte integral de la hidrólisis del GTO. La estequiometría de la degradación del GTO es obtenida combinando la lipólisis del GTO a oleato y glicerol (Ec. 23) y la degradación del glicerol a biomasa y ácido propiónico (Ec. 24):



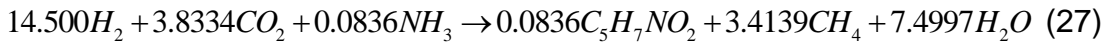
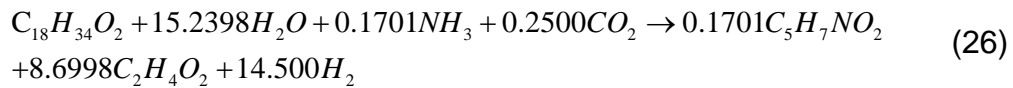
<sup>18</sup> HANAKI K, Matsuo T, Nagase M. 1981. Mechanisms of inhibition caused by long chain fatty acids in anaerobic digestion process. *Biotechnol Bioeng* 23:1591–1610.

<sup>19</sup> SCHAUDER R, Schink B. 1989. *Anaerovibrio glycerini* sp. nov., an anaerobic bacterium fermenting glycerol to propionate, cell matter, and hydrogen. *Arch Microbiol* 152:473–478.

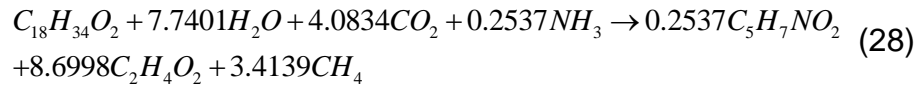
que da como resultado la siguiente reacción global de la degradación del GTO:



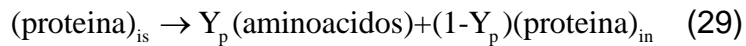
La acetogénesis de LCFA es obtenida combinando el oleato obtenido de la degradación del GTO con la utilización del Hidrógeno como se muestra a continuación:



que da como resultado la reacción global de la degradación del oleato:

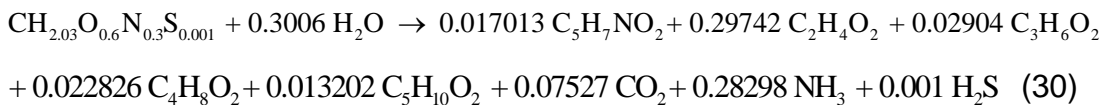


**2.1.3.2.3 Proteínas.** La gelatina (CH<sub>2.03</sub> O<sub>0.6</sub> N<sub>0.3</sub> S<sub>0.001</sub>) es usada como modelo de las proteínas, esta es una mezcla heterogénea de proteínas derivada del colágeno que se obtiene a partir de pieles y huesos. La gelatina es definida en el modelo como proteína insoluble e inerte. Las proteínas son primero hidrolizadas a aminoácidos



donde:  $Y_p$  es el coeficiente enzimático de las proteínas.

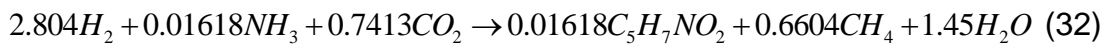
Los aminoácidos son degradados a AGV por las bacterias acidogénicas de aminoácidos



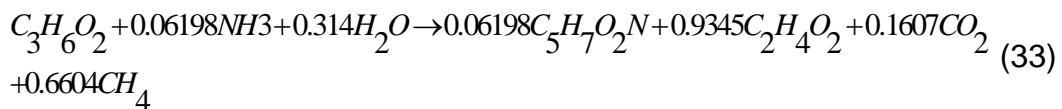
Los principales ácidos que se forma de la degradación de la gelatina son el acético, propiónico, butírico y valérico<sup>20</sup>.

**2.1.3.2.4 Ácidos grasos volátiles.** Angelidaki<sup>21</sup> argumenta que la utilización de hidrógeno es comparativamente más rápida respecto a la oxidación del ácido propiónico, ácido butírico y ácido valérico, por esta razón se combina la etapa acetogénica propiónica, butírica y valérica con la metanogénesis a partir de hidrógeno. La suma de estas dos reacciones hace que se pierda información de la dinámica del fenómeno, pero dada la gran diferencia entre ambas velocidades dicha situación no es limitativa en la práctica.

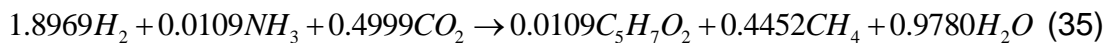
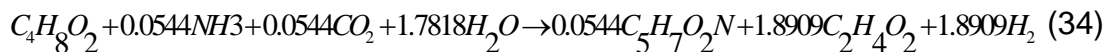
*Acetogénesis propiónica*



Resultando la siguiente reacción global:



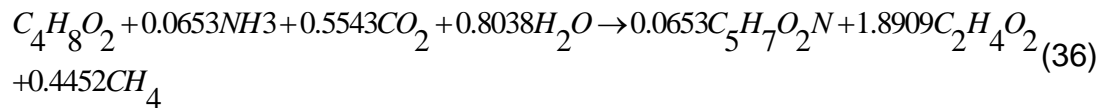
*Acetogénesis butírica*



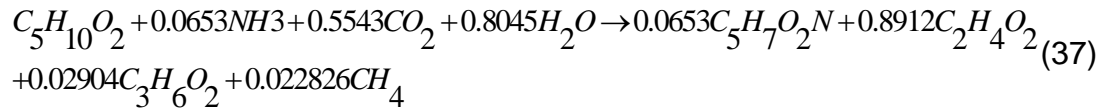
Resultando la degradación global del ácido butírico

<sup>20</sup> Breure AM, Mooijman KA, van Andel JG. 1986. Protein degradation in anaerobic digestion: Influence of volatile fatty acids and carbohydrates on hydrolysis and acidogenic fermentation of gelatin. *Appl Microbiol Biotechnol* 24:426–431.

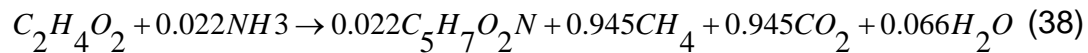
<sup>21</sup> ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. (1993). A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineering* 42: 159-166.



#### *Acetogénesis valérica*



*Metanogénesis.* El ácido acético es degradado a metano y dióxido de carbono por las bacterias acetoclásticas.



Los coeficientes de rendimiento derivados de la estequiometría se muestran en el anexo F.

**2.1.3.3 Modelos cinéticos.** Las cinéticas seleccionadas de la literatura para el desarrollo del modelo fueron:

*Hidrólisis enzimática:* Para el paso hidrolítico, se aplicó la ecuación de primer orden (Ec. 4), la cual ha sido reportada como el modelo cinético que mejor describe esta etapa<sup>22</sup>.

*Sustrato primario:* Para el sustrato se pretende observar el comportamiento que éste tendría con los diversos modelos cinéticos reportados en la literatura y analizados en el capítulo previo. Así los modelos utilizados para el sustrato en este modelo son: Monod (Ec. 1), Moser (Ec. 6), Grau (Ec. 5) e Inhibición por etapas del tipo no competitivo (Ec. 9).

---

<sup>22</sup> PAVLOSTATHIS, S.G y Giraldo-Gomez, E. (1991). Kinetics of anaerobic treatment. Water Science and Technology 24: 35-59.

*Decaimiento de la masa celular:* Generalmente se ha asumido que la mortalidad bacteriana es el 5% de la proporción de crecimiento máxima.

**2.1.3.4 Efecto de la temperatura.** Este efecto se presenta en las constantes de equilibrio y las constantes cinéticas.

*Constantes de equilibrio:* La variación de estas constantes con la temperatura es muy importante para el cálculo del equilibrio químico, estas fueron correlacionadas para el intervalo de 30 – 60 °C de la siguiente forma (Tabla 5):

$$X(T) = X_{T_o} + a*(T - T_o) + b*(T - T_o)^2 + c*(T - T_o)^3 \quad (39)$$

donde:

$T_o$  = Temperatura de referencia (°C).

$X_{T_o}$  = Valor del parámetro a la temperatura de referencia.

A, b, c = Constantes determinadas en el rango de interés.

**Tabla 5.** Constantes de equilibrio usadas en el modelo.

Propiedad	X(55°C)	X(T <sub>o</sub> )	T <sub>o</sub> (°C)	a	b	c
Pka NH <sub>3</sub>	17.58	52.9	0	-1.454	0.021	-1.13*10 <sup>-4</sup>
Pka Ac	4.76	-	-	-	-	-
Pka Apr	4.89	-	-	-	-	-
Pka Abut	4.89	-	-	-	-	-
Pka1 CO <sub>2</sub>	6.295	6.539	0	-0.010	1.01*10 <sup>-4</sup>	0
Pka2 CO <sub>2</sub>	10.15	10.619	0	-0.014	1.01*10 <sup>-4</sup>	0

Fuente: Scenna 1999

La variación de la constante de ionización del agua con respecto a la temperatura en el intervalo de 30 a 60 °C fue correlacionada como:

$$pK_w = 4.771 + \frac{2747}{T + 273.15} \quad (40)$$

*Velocidad máxima de crecimiento específico:* La dependencia de la velocidad máxima de crecimiento específico con la temperatura fue correlacionada de

una forma lineal, correspondiente a la relación encontrada por Hashimoto, con una extensión para cubrir tanto bajas como altas temperaturas.

Cuando la temperatura es menor que la temperatura óptima se tiene:

$$\mu_{\max}(T) = \mu_{\max, T_{opt}} - \alpha * (T_{opt} - T) \quad (41)$$

Cuando la temperatura es mayor que la temperatura óptima se tiene:

$$\mu_{\max}(T) = \mu_{\max, T_{opt}} * \frac{T_{\max} - T}{T_{\max} - T_{opt}} \quad (42)$$

donde:

$T_{opt}$  = Temperatura de la velocidad máxima de crecimiento.

$T_{\max}$  = Temperatura máxima donde el crecimiento cesa.

$\alpha$  = Coeficiente de la temperatura.

Estas expresiones fueron estimadas experimentalmente en el intervalo de 40–64 °C, generando la siguiente tabla:

**Tabla 6.** Constantes cinéticas usadas en el modelo.

Grupo	Constantes cinéticas			Dependencia con T		
	$\mu_{\max} T_{opt} (d^{-1})$	$K_s (g/l)$	$K_i (g/l)$	$A (d^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1})$	$T_{opt} (^\circ\text{C})$	$T_{\max} (^\circ\text{C})$
<i>Hidrolíticas</i>	1.0	-	0.33	0.0	55	65
<i>Ácidogénicas</i>	5.0	0.500	-	0.0	55	65
<i>A. Propiónico</i>	0.54	0.259	0.96	$1.7 \cdot 10^{-4}$	60	70
<i>A. butírico</i>	0.68	0.176	0.72	$1.8 \cdot 10^{-4}$	60	70
<i>Metanogénica</i>	0.60	0.120	0.26	$1.7 \cdot 10^{-4}$	55	65

Entiendase por  $K_{HID}$

Fuente: Scenna 1999

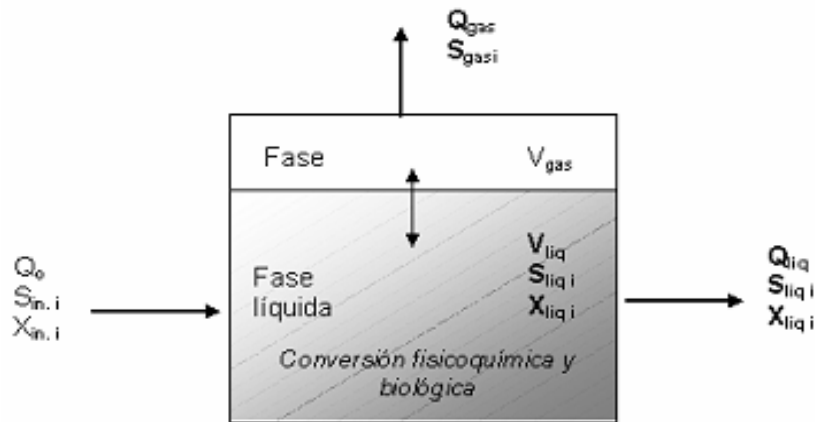
## 2.2 MODELO MATEMÁTICO

Las ecuaciones que constituyen el modelo son los balances de masa para cada componente (sustratos primarios e intermedios) en estado estacionario; estas ecuaciones se expresan como se describe en la ecuación (43) para cualquier reactante haciendo cero el término de velocidad de acumulación.

**2.2.1 Balances de materia.** La conexión entre la biomasa y los sustratos son el factor fundamental para comprender y explotar los sistemas microbianos para el control de la contaminación. Debido a que estas conexiones deben hacerse sistemática y cuantitativamente para la ingeniería de diseño y la operación de los sistemas, los balances de materia resulta un procedimiento esencial. El balance de materia referido a cualquier reactante (o producto) para un elemento de volumen de reacción es:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de acumulación} \\ \text{del reactante en el} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de entrada} \\ \text{del reactante al} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de salida} \\ \text{del reactante del} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad neta de consumo} \\ \text{del reactante en el} \\ \text{elemento de volumen} \end{array} \right] \quad (43)$$

**2.2.2 Balances de materia para el digester CSTR.** En un reactor CSTR la composición del medio reaccionante es la misma en todos los puntos a cada instante, y la composición de la corriente de salida es la misma a la del interior del reactor. Así, el balance escrito para el elemento de volumen es aplicable al reactor “completo”.



**Figura 4.** Esquema de un reactor CSTR

**2.2.2.1 Fase líquida.** En la fase líquida se encuentra el material orgánico soluble e insoluble del efluente a tratar así como los compuestos inorgánicos y la biomasa.

**2.2.2.1.1 Balance para el material orgánico insoluble.** El material orgánico insoluble está constituido por carbohidratos y proteínas.

*Carbohidratos:*

$$Q_o * C_{CINS}^o - Q_s * C_{CINS} + V * Y_e * k_{CHID} * C_{CINS} = 0 \quad (44)$$

donde:

$Y_e$  = Eficiencia enzimática.

$Q_o$  = Flujo Volumétrico de entrada ( $L^3/T$ ).

$Q_s$  = Flujo Volumétrico de salida ( $L^3/T$ ).

$C_{INS}^o$  = Concentración de carbohidratos insoluble de entrada ( $M_s/L^3$ ).

$C_{INS}$  = Concentración de carbohidratos insoluble a la salida ( $M_s/L^3$ ).

$V$  = Volumen de reacción ( $L^3$ ).

$K_{CHID}$  = Constante de hidrólisis de carbohidratos ( $T^{-1}$ ).

*Proteínas:*

$$Q_o * C_{pINS}^o - Q_s * C_{pINS} + V * Y_p * k_{PHID} * C_{pINS} = 0 \quad (45)$$

$Y_p$  = Eficiencia enzimática.

$C_{pINS}$  = Concentración de proteínas insoluble ( $M_s/L^3$ ).

$K_{PHID}$  = Constante de hidrólisis de proteínas ( $T^{-1}$ ).

**2.2.2.1.2 Balance para el material orgánico soluble.** El material orgánico soluble está definido por carbohidratos, proteínas y lípidos.

*Carbohidratos:*

$$Q_o * C_{cs}^o - Q_s * C_{cs} + V * Y_{cs}^{acidc} * \mu_{acidc} * X_{acidc} + V * Y_e * k_{CHID} * C_{CINS} = 0 \quad (46)$$

donde:

$Y_{cs}^{acidc}$  = Coeficiente de rendimiento de la etapa acidogénica de carbohidratos soluble ( $M_s/M_x$ ).

$\mu_{acidc}$  = Velocidad específica de crecimiento de las bacterias acidogénicas de

carbohidratos soluble ( $T^{-1}$ ).

$X_{acide}$  = Concentración de las bacterias acidogénicas de carbohidratos ( $T^{-1}$ ).

$C_{cs}$  = Concentración de carbohidratos solubles ( $M_s/L^3$ ).

**Aminoácidos:**

$$Q_o * C_{ps}^o - Q_s * C_{ps} + V * Y_{ps}^{acidp} * \mu_{acidp} * X_{acidp} + V * Y_p * k_{pHID} * C_{pINS} = 0 \quad (47)$$

donde:

$Y_{ps}^{acidp}$  = Coeficiente de rendimiento de la etapa acidogénica de proteínas soluble ( $M_s/M_x$ ).

$\mu_{acidp}$  = Velocidad específica de crecimiento de las bacterias acidogénicas de proteínas soluble ( $T^{-1}$ ).

$X_{acidp}$  = Concentración de las bacterias acidogénicas de proteínas ( $T^{-1}$ ).

$C_{ps}$  = Concentración de proteínas soluble ( $M_s/L^3$ ).

**Lípidos:**

$$Q_o * C_{GTO}^o - Q_s * C_{GTO} + V * Y_{GTO}^{lip} * \mu_{lip} * X_{lip} = 0 \quad (48)$$

donde:

$Y_{GTO}^{lip}$  = Coeficiente de rendimiento de la etapa lipídica ( $M_s/M_x$ ).

$\mu_{lip}$  = Velocidad específica de crecimiento de las bacterias lipídicas ( $T^{-1}$ ).

$X_{lip}$  = Concentración de las bacterias lipídicas ( $T^{-1}$ ).

$C_{GTO}$  = concentración de lípidos ( $M_s/L^3$ ).

**Balance para sustratos intermedios (AGV).** Se puede considerar una ecuación de balance general para los AGV (acético, propiónico, butírico y valérico):

$$Q_o * C_j^o - Q_s * C_j + \sum_{k=1}^{k=6} V * Y_j^k * \mu_k * X_k = 0 \quad (49)$$

donde los subíndice y superíndices son:

j = Hace referencia a una especie química.

K= Especie biológica o etapa de degradación en la que interviene.

o = Entrada.

s = Salida.

El coeficiente de rendimiento  $Y_j$  puede ser positivo (+), negativo (-) o cero (0) si la especie química j se produce, consume o no toma parte de la etapa de degradación k en cuestión. La sumatoria desde k=1 hasta 6 representa la utilización o producción total del sustrato intermedio j en el proceso de degradación. El hecho de que en una de las etapas k actúe como “reactivo” o “producto” lo reflejará el signo algebraico de  $Y_j^k$ .

Balance de materia general para la especie biológica k:

$$Q_o * X_k^o - Q_s * X_k + V * (\mu_k - u_k) * X_k = 0 \quad (50)$$

donde:

$u_k$  = Coeficiente de decaimiento para la biomasa suspendida ( $T^{-1}$ ).

**2.2.2.2 Fase gaseosa.** Los productos finales del proceso de la digestión anaerobia son biogás (metano, dióxido de carbono y ácido sulfhídrico), agua (AGV) y biomasa. Así las ecuaciones que describen la fase gaseosa son solamente los balances de materia de metano, dióxido de carbono y ácido sulfhídrico por lo que quedan determinados por la siguiente ecuación general:

$$Q_o * C_j^o - Q_s * C_j + \sum_{k=1}^{k=6} V * Y_j^k * \mu_k * X_k - V * K_{lg} * (C_j^d - \frac{1}{H_j} * P_i * y_j) = 0 \quad (51)$$

donde:

$H_j$  = Constante de Henry para cualquier componente ( $atm \cdot l/mol$ ).

$K_{lg}$  = Coeficiente de transferencia de masa ( $T^{-1}$ ).

$P_i$  = Presión total (atm).

$y_j$  = Fracción molar ( $M_x/M_x$ ).

El superíndice <sub>d</sub> significa disuelto.

Esta ecuación muestra que el último término representa la transferencia líquido – gas del componente en cuestión. Para los componentes que no tienen transferencia este término se anula de la ecuación. Aprovechando la integración del módulo al simulador HYSYS se realiza la transferencia de líquido – gas de los compuestos que van a estar presentes en el biogás a través de un flash.

**2.2.2.3 Cálculo del pH.** El valor del pH fue determinado por el equilibrio iónico de los componentes presentes en el líquido. Para esto se planteó un balance de cargas global de la siguiente forma:

$$[H^+] - [OH^-] = Ch(pH) \quad (52)$$

donde :

$Ch(pH)$  Es el pH dependiente de la carga iónica.

$$Ch(pH) = [HCO_3^-] + 2[CO_3^{2-}] + \sum [AGV^-] + [proteinas^-] - [NH_4^+] - [proteina^+] \quad (53)$$

Para mantener la exactitud numérica y evitar un desbordamiento la ecuación anterior se resolvió como sigue:

Para  $Ch(pH) > 0$

$$[H^+] = \frac{Ch(pH) + \sqrt{Ch(pH)^2 + 4 * k_w}}{2} \quad (54)$$

Para  $Ch(pH) < 0$

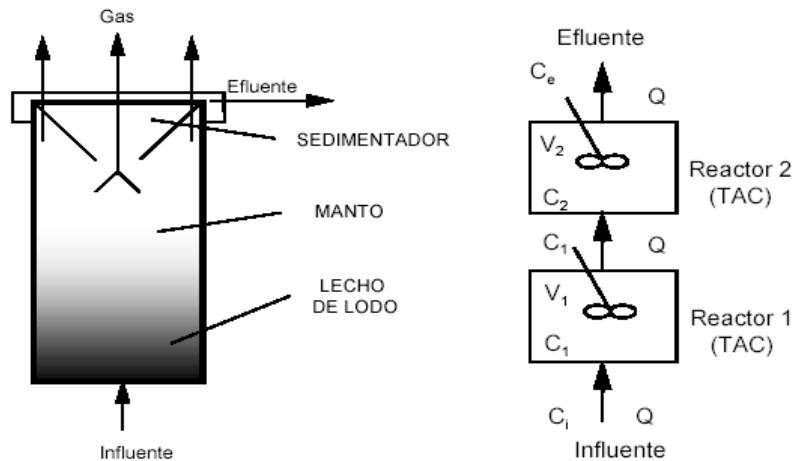
$$[H^+] = \frac{2k_w}{-Ch(pH) + \sqrt{Ch(pH)^2 + 4 * k_w}} \quad (55)$$

con este valor se procedió a calcular el pH:

$$pH = -\log[H^+] \quad (56)$$

**2.2.3 Balance materia para el digester UASB.** Este sistema consiste de dos digestores CSTR idénticos<sup>23</sup>. En el primer digester tiene lugar la hidrólisis del material particulado, mientras en el segundo se produce la acidogénesis, la acetogénesis y la metanogénesis de los compuestos solubles producidos durante la hidrólisis, en la etapa hidrolítica se asumió el modelo cinético de primer orden y para las otras etapas del proceso los modelos cinéticos mencionados en el sistema del reactor CSTR.

Los balances de masas se desarrollaron siguiendo la misma metodología que para el modelo del digester anaerobio CSTR. El esquema conceptual de este sistema se presenta en la figura 5.



**Figura 5.** Esquema conceptual del reactor UASB

<sup>23</sup> SEGHEZZO, L. y Cardón, L. (2001). Formulación de un Modelo Matemático para Simular la Digestión Anaerobica de Efluentes Orgánicos en Reactores UASB. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente 5:06.23-06.28.

## 2.3 DESARROLLO DEL MÓDULO DE SIMULACIÓN

El módulo desarrollado en este trabajo consta de dos digestores anaerobios (CSTR y UASB) que se acoplaron al simulador HYSYS 3.1. Esto se lleva a cabo a través de programación en Visual Basic y uso del paquete Extension View Editor de HYSYS.

Se escogió el simulador HYSYS 3.1 para el desarrollo de la simulación porque este posee un ambiente de simulación y su diseño de software ofrece una programación orientada a objetos lo que permite su interacción con Visual Basic para la creación de las extensiones de los digestores anaerobios. Las ventajas que ofrece el entorno del simulador HYSYS 3.1 son la opción de integrar el digestor anaerobio con las demás operaciones unitarias para poder manejar los efluentes del digestor y así complementar la simulación del bioproceso. Además se cuenta con la disponibilidad de los paquetes de propiedades presentes en HYSYS y la amplia gama de opciones que tiene el simulador para el análisis de los procesos, como son los casos de estudio donde se puede realizar un análisis detallado de las variables de cada equipo y del proceso, mostrando de una forma gráfica la dependencia de las variables en cuestión.

**2.3.1 Extensión.** El simulador HYSYS 3.1 brinda la posibilidad de incrementar su funcionalidad a través de la creación de extensiones de operaciones unitarias, reacciones cinéticas y paquetes de propiedades; éstas se comportan de manera semejante a cualquier operación existente en el simulador, la diferencia radica en que el algoritmo usado por la extensión reside en un archivo externo a HYSYS. Anexo F.

**2.3.2 Algoritmo para el digestor CSTR.** Se realiza la lectura de los datos de entrada verificando las condiciones de operación del digestor,

temperatura, presión, caudal del efluente, caracterización de la corriente y volumen o tiempo de retención hidráulico.

Se verifica que la temperatura este en el rango permitido para llevar a cabo la operación, el rango de trabajo es 25-64 °C, si el valor de la temperatura se encuentra en este intervalo se prosigue, de lo contrario se ajusta el valor al limite inferior o superior del intervalo.

En la composición debe ingresar material orgánico insoluble o soluble para iniciar la operación de lo contrario, se procede nuevamente a la lectura de los datos de entrada. Las composiciones de entrada se verifican para evitar la entrada de biomasa al digestor y requerir la entrada de agua en caso de su ausencia

A continuación se realiza el cálculo de los parámetros cinéticos y físicos en función de la temperatura de trabajo, estos parámetros son: las constantes de disociación y la tasa específica de crecimiento máximo.

Se procede a definir el modelo cinético con el cual se desea trabajar, teniendo en cuenta que si se selecciona el modelo de Monod se puede seleccionar el nivel de inhibición, siendo este acumulativo al incrementarse. Seleccionado el modelo calculan las velocidades cinéticas para cada sustrato que hace parte del proceso de digestión.

Se procede a resolver los balances de masa, para determinar las concentraciones a la salida del digestor. Obtenidos los valores de las concentraciones a partir de los balances se calcula la transferencia de masa de los componentes que estarán presentes en el gas (Metano, Dióxido de carbono, Agua y Ácido sulfhídrico).

Las corrientes de salida del digestor anaerobio se especifican una vez realizados los pasos anteriores. Definidas las condiciones de salida se realiza el cálculo del pH y los estimativos teóricos de la demanda química de oxígeno (DQO), sólidos suspendidos y sólidos totales.

**2.3.3 Descripción del algoritmo para el digestor UASB.** El procedimiento es similar que el realizado para el digestor CSTR, diferenciándose en algunas características propias del UASB.

Se verifica las condiciones de operación del digestor, el valor de la temperatura debe estar en el intervalo permitido, que el porcentaje del volumen del digestor UASB para la hidrólisis esté en el intervalo de 20-70%, de no encontrarse en este intervalo se ajusta el valor al 50%.

Se comprueba que en la composición de la corriente de entrada al digestor se encuentre presente material orgánico a hidrolizar, esto sugiere la presencia de carbohidratos o proteína insoluble, de no ser así se retorna a la lectura de los datos. Las composiciones de entrada se verifican para evitar la entrada de biomasa al digestor y requerir la entrada de agua en caso de su ausencia. A continuación el procedimiento es igual que el descrito para el digestor CSTR.

**2.3.4 Limitaciones de las extensiones.** La simulación se llevará a cabo en estado estacionario e isotérmica y utilizando sustratos simples, la corriente de entrada a los digestores deberá estar definida libre de biomasa, además se podrá definir únicamente a través de la vista “DefineStream” diseñada en las extensiones, esto se explica en el Anexo D. Las extensiones de los equipos no son archivos ejecutables por lo que se debe realizar su registro en el simulador HYSYS. Ver Anexo C.

### 3. ANALISIS DE RESULTADOS

Los siguientes análisis permitieron la comprobación del modelo matemático expuesto en los capítulos previos y el perfecto acople del modulo propuesto en este trabajo al simulador HYSYS 3.1; mostrando las diferentes interacciones con el ambiente del simulador y sus poderosas herramientas.

Para este estudio se debe tener en cuenta que el tiempo de retención de sólidos o edad del lodo ( $\theta_x$ ) es un descriptor fundamental del estado fisiológico del sistema, por que suministra información directa sobre la tasa específica de crecimiento de los microorganismos y es el recíproco de la tasa de crecimiento específico. Para los digestores estudiados en este proyecto (CSTR y UASB) donde la entrada de biomasa es cero, el tiempo de retención de sólidos es igual al tiempo de retención hidráulico (TRH).

$$TRH = \frac{V}{Q} \quad (57)$$

donde:

V = Volumen de reacción

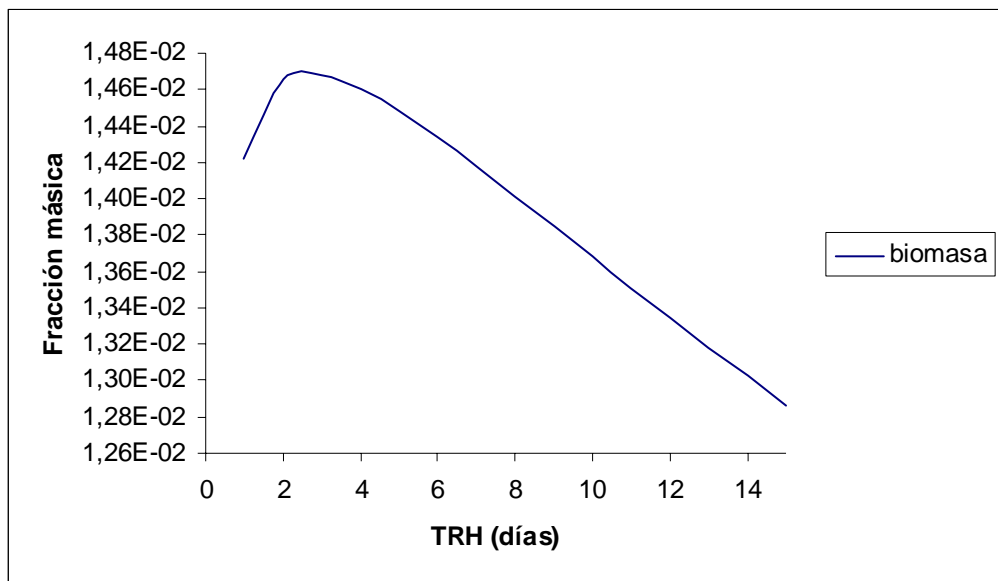
Q = Flujo volumétrico

#### 3.1 ANALISIS REALIZADOS A LAS EXTENSIONES

Aprovechando la integración del módulo a HYSYS se realizaron los análisis de resultados a través de casos de estudio desarrollados en el simulador para determinar el comportamiento de las diversas concentraciones de biomasa y sustrato a los diferentes TRH para los cuales se alcanza el estado estacionario, así como respecto a otras variables del proceso.

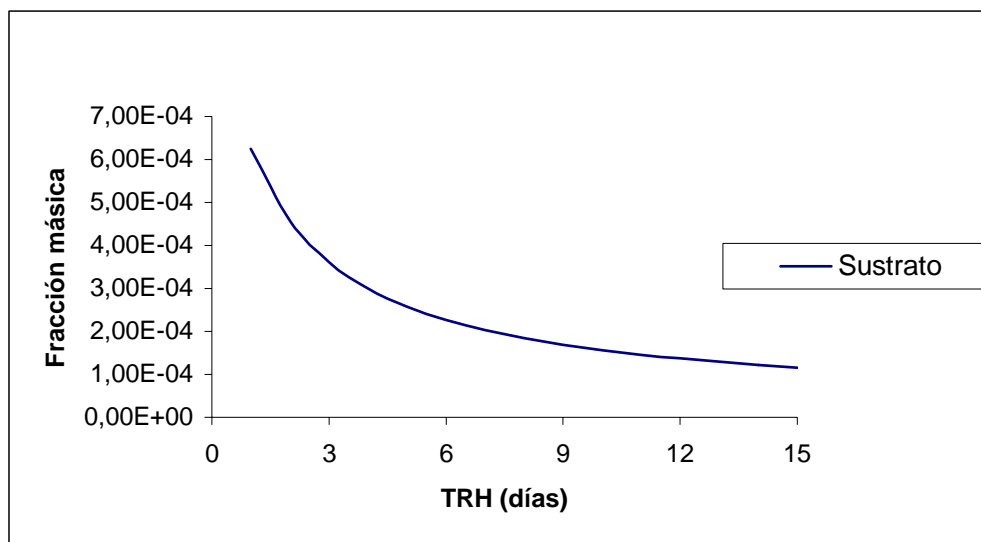
### 3.1.1 Comportamiento de la concentración de la biomasa y el sustrato en función del TRH.

Esta simulación se realizó para diversas concentraciones de sustrato donde se presentó la misma tendencia para todas y se logró determinar las curvas características que describen el comportamiento general del sustrato y la biomasa en estado estacionario en función del TRH; además se obtuvieron los parámetros para la elección del TRH más apropiado en el estado estacionario del proceso, según los criterios del efluente a tratar.



**Figura 6.** Esquema de la variación de la biomasa en función del TRH.

Las figuras 6 y 7 muestran el control del TRH ejercido sobre el sustrato y la biomasa, pero como se mostró en la ecuación 57 para poder controlar el TRH el volumen puede alterarse.



**Figura 7.** Esquema de la variación del sustrato en función del TRH.

Estas gráficas permiten obtener algunos parámetros delimitadores importantes para tomar una decisión acertada en la elección del TRH apropiado, como el tiempo de retención mínimo ( $\theta_{\min}$ ) que es el tiempo de retención hidráulica mínimo para el cual se logra el estado estacionario; en las figuras 6 y 7 el  $\theta_{\min}$  se presenta como el TRH donde empieza el crecimiento microbiano y el consumo del sustrato. La figura 7 también muestra que para TRH mayores a  $\theta_{\min}$  el sustrato disminuye monótonamente al aumentar el TRH, esta tendencia se puede analizar matemáticamente por la ecuación del balance de materia para cada grupo bacteriano, sustituyendo el TRH por  $\theta_{\min}$ ; si en esta misma ecuación se hace infinito el TRH se encuentra otro importante delimitador, el sustrato mínimo  $s_{\min}$ , que es la concentración mínima de sustrato capaz de mantener la biomasa en estado estacionario como se muestra en las figuras 6 y 7. Si la concentración del sustrato es menor que  $s_{\min}$  el crecimiento específico neto de células es negativo y la biomasa no se acumulara o desaparecerá gradualmente. Por consiguiente la biomasa en estado estacionario solo puede sostenerse cuando la concentración del sustrato es mayor a  $s_{\min}$ .

Además cuando TRH es mayor que el  $\theta_{\min}$ , la biomasa aumenta inicialmente alcanzando un valor máximo y disminuye después cuando en la tasa neta de crecimiento predomina el agotamiento, si TRH se aproxima a infinito el valor de la biomasa se vuelve cero.

A TRH menores que  $\theta_{\min}$  se produce una situación interesante e importante para el diseño y la operación de los digestores anaerobios llamada fuga, que es la zona a TRH menores que  $\theta_{\min}$ , donde no se produce eliminación del sustrato y no hay acumulación de biomasa, esto hace que  $\theta_{\min}$  sea un parámetro importante en el análisis de digestores puesto que es el valor frontera entre la fuga y la biomasa de estado estacionario.

Los análisis realizados anteriormente para las figuras 6, 7 indican que la concentración del sustrato puede reducirse desde la concentración entrada al digestor hasta la concentración de sustrato mínimo cuando se aumenta el TRH de  $\theta_{\min}$  a infinito; todo lo anterior se realiza para mantener el estado estacionario. El valor exacto de TRH que se seleccione para el diseño dependerá del equilibrio entre la eliminación del sustrato y la producción de biomasa. En la práctica se ha establecido un factor de seguridad microbiológico definido por la relación TRH y  $\theta_{\min}$  ecuación (58), algunos de los factores de seguridad se muestran en la tabla 7.

$$FS = \frac{TRH}{\theta_{\min}} \quad (58)$$

donde:

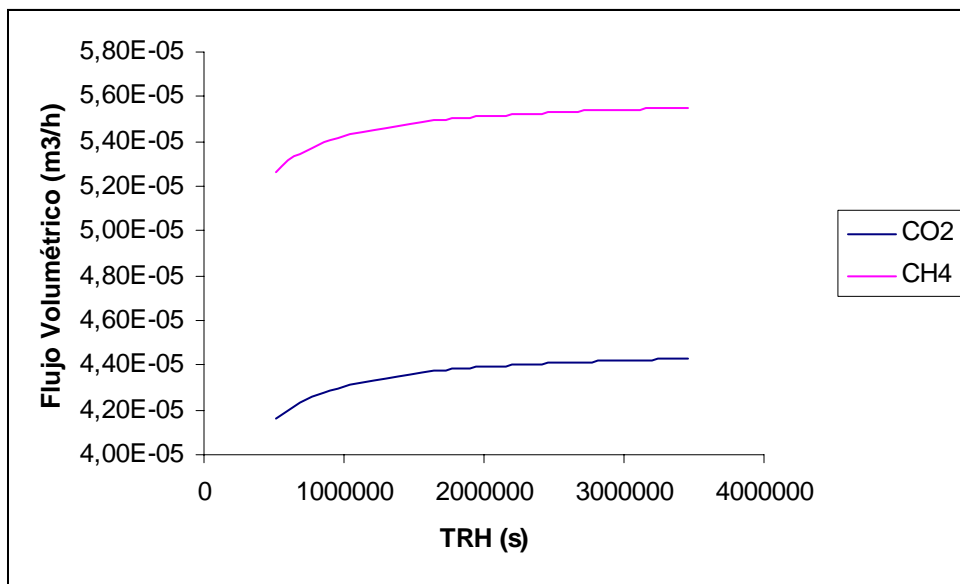
$FS$  = Factor de Seguridad.

**Tabla 7.** Factor de seguridad para cargas biológicas típicas.

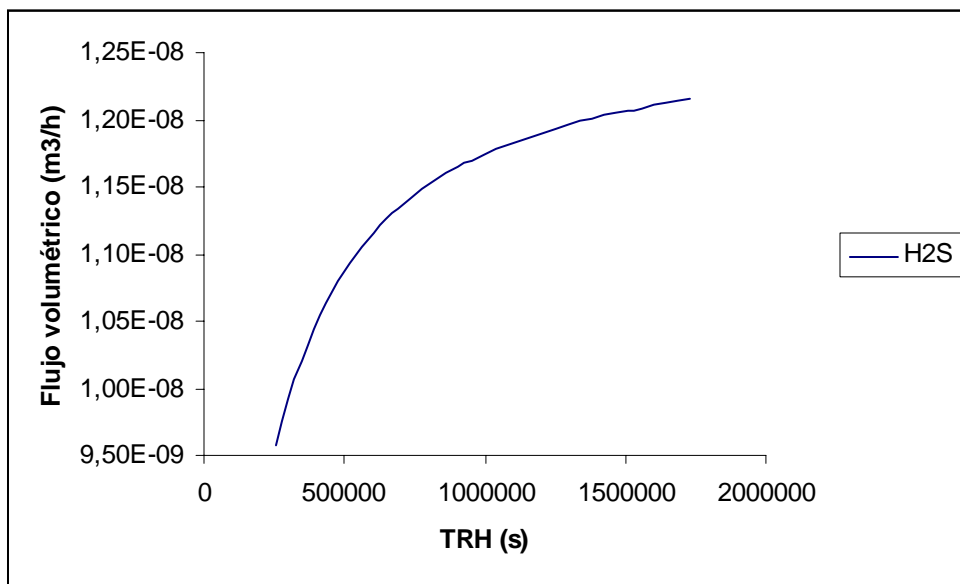
<b>CARGA</b>	<b>SF PROPUESTO</b>
Convencional	10-80
Alto rendimiento	3-10
Bajo rendimiento	>80

Fuente: Rittman 2001

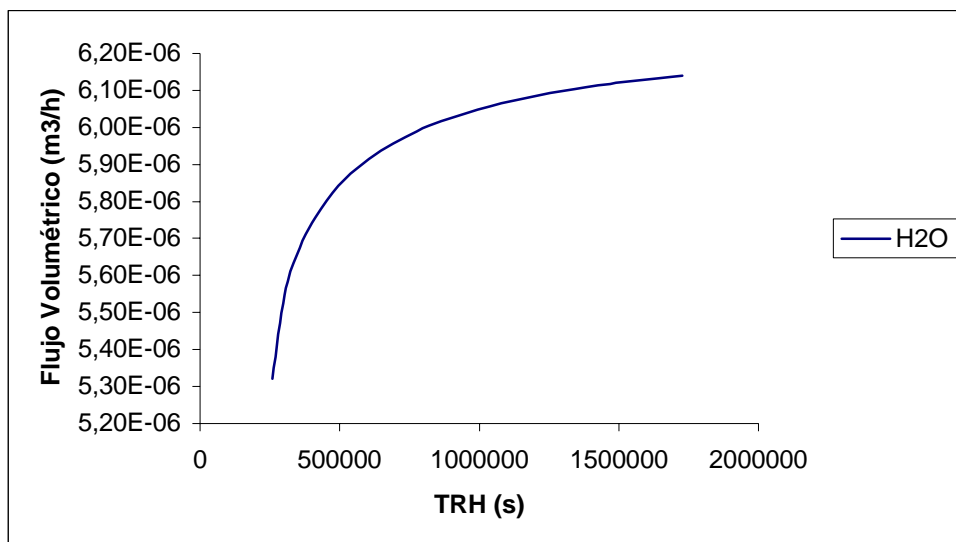
**3.1.2 Comportamiento del biogás en función del TRH.** Los principales componentes del biogás son el metano y el dióxido de carbono, su comportamiento en función al TRH se muestra en la figura 8. A medida que el TRH transcurre el flujo volumétrico del biogás aumenta, donde el mayor aumento se realiza a TRH bajos, pero no menores al  $\theta_{min}$  donde se presenta la mayor actividad metanogénica como se mencionó en el análisis de la figura 6, a TRH mayores el aumento del biogás es menor debido a que la biomasa tiene que cumplir con las funciones de mantenimiento endógeno y muerte. La figura 8 muestra que el metano presenta un mayor flujo volumétrico que el dióxido de carbono comprobando las tendencias reportadas en la literatura, además del metano y el dióxido de carbono, el biogás contienen pequeñas cantidades de ácido sulfhídrico y agua como lo confirma las figuras 9 y 10.



**Figura 8.** Comportamiento del biogás (CH<sub>4</sub> y CO<sub>2</sub>) en función del TRH



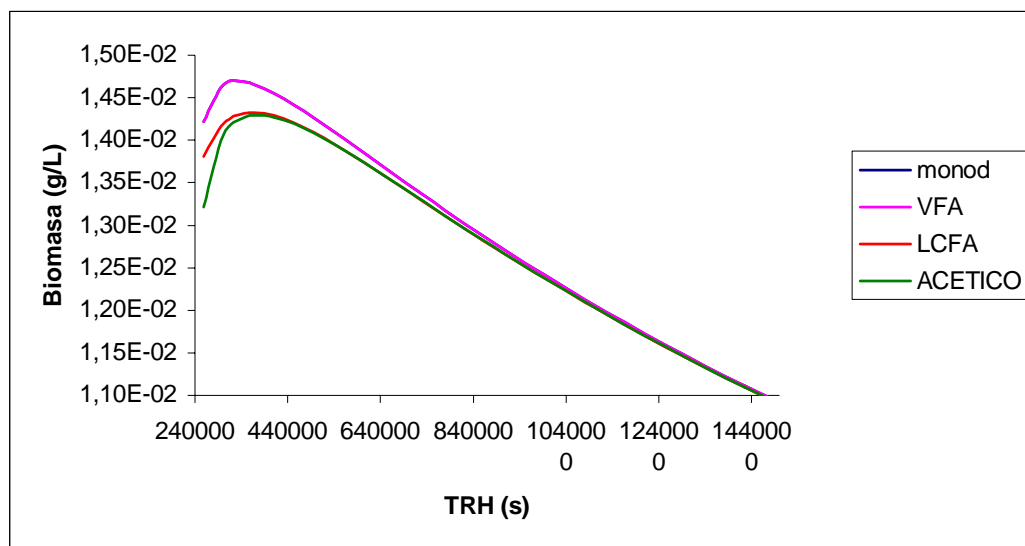
**Figura 9.** Comportamiento del H<sub>2</sub>S en el biogás en función del TRH



**Figura 10.** Comportamiento del H<sub>2</sub>O en el biogás en función del TRH

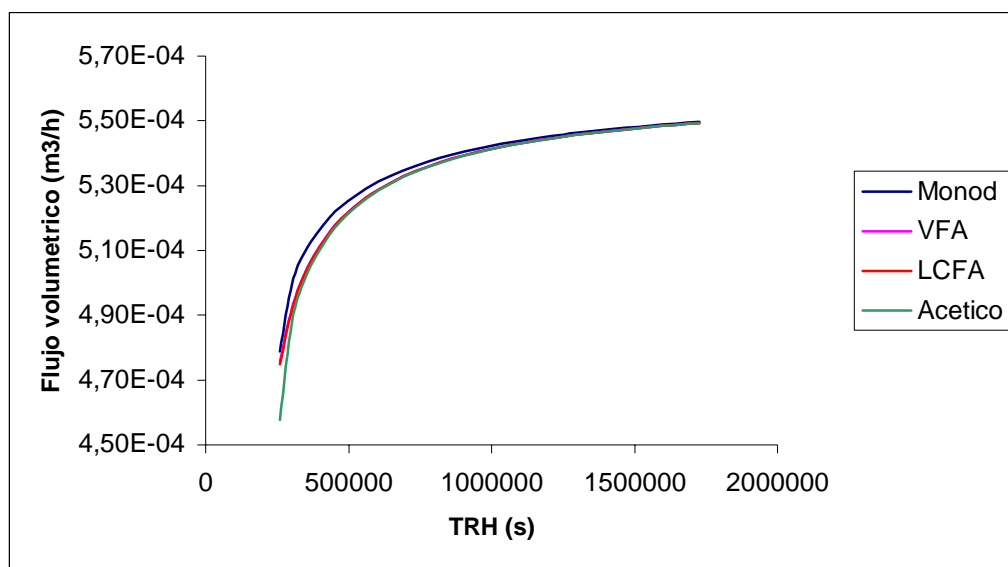
### 3.1.3 Comparación de los modelos cinéticos de inhibición simulados.

Los modelos cinéticos de inhibición incluyen los efectos tóxicos que afectan el proceso de la digestión anaerobia, los modelos simulados fueron: inhibición por AGV, por LCFA y por ácido acético. Para estos se compara el efecto que produce en la biomasa con el modelo cinético de Monod como se muestra en la figura 11. Las simulaciones para todos los casos se realizaron a las mismas condiciones donde la inhibición por AGV tiene un efecto tóxico para la biomasa desviándose del modelo de Monod; la inhibición de LCFA produce un ligero efecto por la interacción de estos ácidos con la biomasa, alterando la tasa neta de crecimiento como muestra la figura 11, donde el punto máximo de crecimiento es menor en comparación al modelo de Monod de hecho en el capítulo previo se describió la inhibición por este tipo de componente. Este mismo comportamiento sucede para la inhibición por ácido acético que también presentan un ligero efecto sobre la biomasa.



**Figura 11.** Comportamiento de la biomasa para el modelo de Monod y el de inhibición.

El efecto de la inhibición se refleja en los productos de la digestión anaerobia como se mostró en la figura 11 para la biomasa, la figura 12 presenta este mismo efecto bajo las mismas condiciones para los diferentes modelos de inhibición en el biogás. El flujo volumétrico de metano muestra una leve disminución al aumentar el TRH en comparación al modelo de Monod porque en ese mismo intervalo se ve afectada la actividad metanogénica como se mostró en la figura 11.



**Figura 12.** Comportamiento del sustrato para el modelo de Monod y el de inhibición

Para los siguientes cinco análisis se trabajó con un volumen de digestor constante de  $1\text{m}^3$ , temperatura de  $50^\circ\text{C}$ , variando el tiempo de retención hidráulico y se analizaron cuatro diferentes caracterizaciones de sustrato:

1. C1: Caracterización reportada para un efluente. (Tabla 8)
2. C2: Efluente con carga alta de carbohidratos
3. C3: Efluente con carga alta de proteínas
4. C4: Efluente con carga alta de lípidos

**Tabla 8.** Caracterización reportada de sustrato

COMPONENTE	CONCENTRACION (g/L)
Carbohidratos insoluble	31.2
Carbohidratos soluble	7.6
Lípidos	9.2
proteínas insolubles	9.0
Acetato	3.1
Propianato	1.6

Butirato	0.1
Amoniaco	2.5
CO2	2.88

FUENTE: Angelidaki (1999)

Las demás concentraciones mantienen la misma caracterización que en C1, pero se especifica una composición de 150 g/L para cada carga.

### 3.1.4 Variación del pH contra el tiempo de retención hidráulico (TRH).

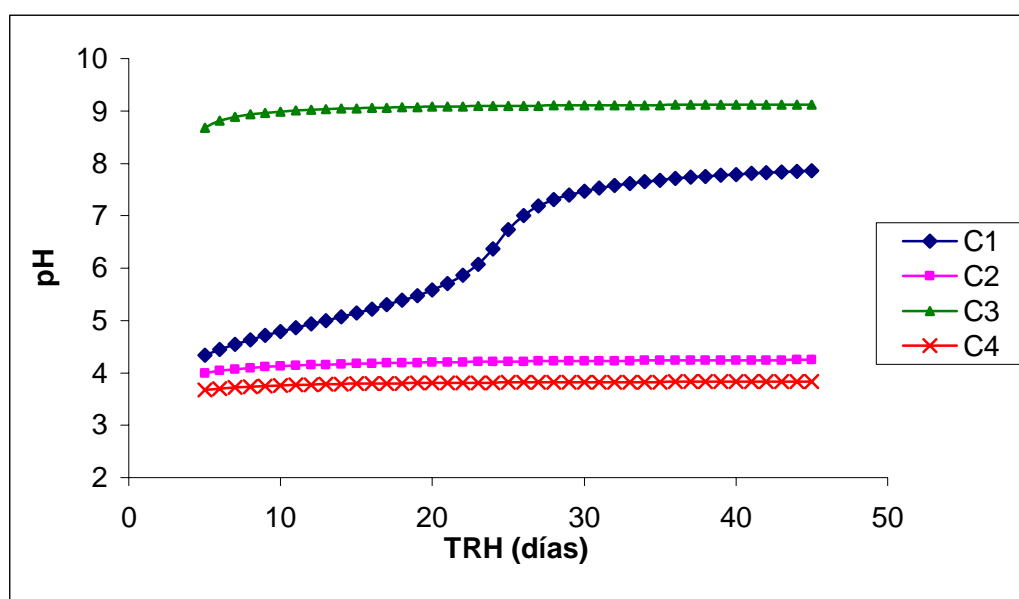


Figura 13. pH contra el tiempo de retención hidráulico

Al analizar la gráfica se puede observar que la variación del pH para un efluente residual de concentración C1, que es la reportada en la literatura, el equilibrio iónico del sistema tiende a estabilizar el pH, observándose primero un incremento por acción del amoniaco presente y luego una tendencia a estabilizar el valor de pH para tiempos de retención mayores.

Se observa que la tendencia para una corriente con alta carga de proteínas es alcalinizar la solución debido al aumento del amoníaco resultante de la hidrólisis de la proteína insoluble, desplazando el equilibrio hacia la alcalinidad del sistema.

Para cargas altas de lípidos el pH se mantiene ácido, presentándose un leve incremento al aumentar el tiempo de retención, debido a que a mayores TRH el porcentaje de proteínas insolubles que se hidrolizan aumentan aportando amoníaco al sistema. Para mayores TRH la actividad de las etapas acetogénica y metanogénica son mayores, reduciendo la presencia de VFA y ácido acético en el equilibrio.

Para una carga alta de carbohidratos la tendencia tiende a ser la misma que para los lípidos ya que no hay una presencia de proteínas o entrada de amoníaco que pueda elevar el valor de pH a un rango neutro.

**3.1.5 Variación del flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico.** La tendencia de todas las concentraciones dadas es hacia la disminución del flujo másico de metano a medida que se incrementa el tiempo de retención. Esto se puede explicar ya que los análisis se realizaron para un volumen del digestor anaerobio constante, entonces al variar el tiempo de retención en el digestor, el caudal de la corriente de alimento disminuye, esto influye de manera negativa en el crecimiento de las bacterias degradadoras de sustrato, ya que las bacterias tienen una fuente de alimento menor cuando el tiempo de retención aumenta, por lo que se presenta la disminución en el flujo másico de metano. Como se puede observar en los resultados obtenidos para la producción de metano, son los lípidos los que brindan una mayor producción de metano tal y como se reporta en la literatura.

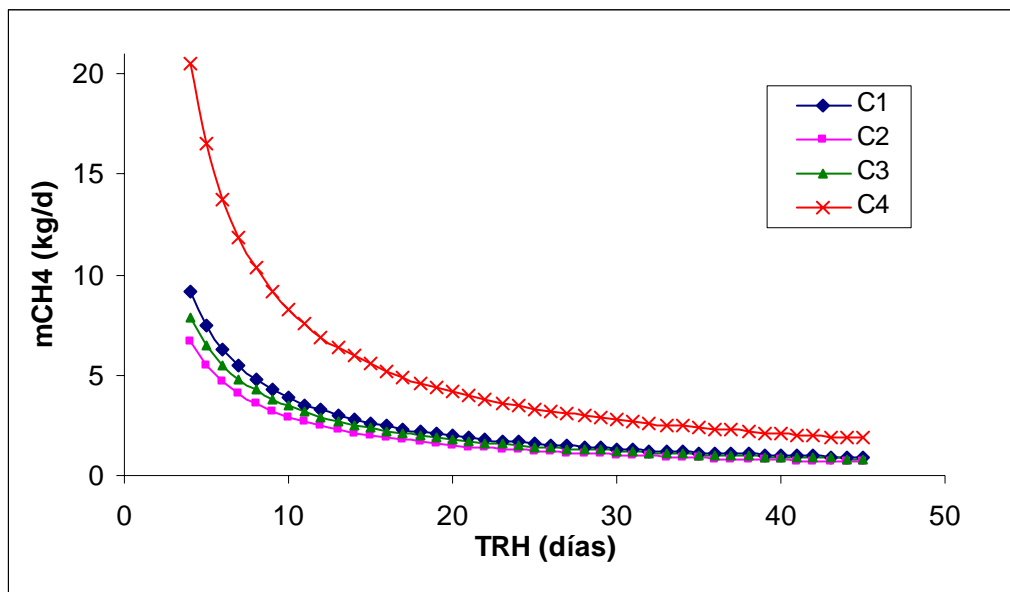


Figura 14. Flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico

### 3.1.6 Variación del porcentaje de metano en el biogás contra el tiempo de retención hidráulico.

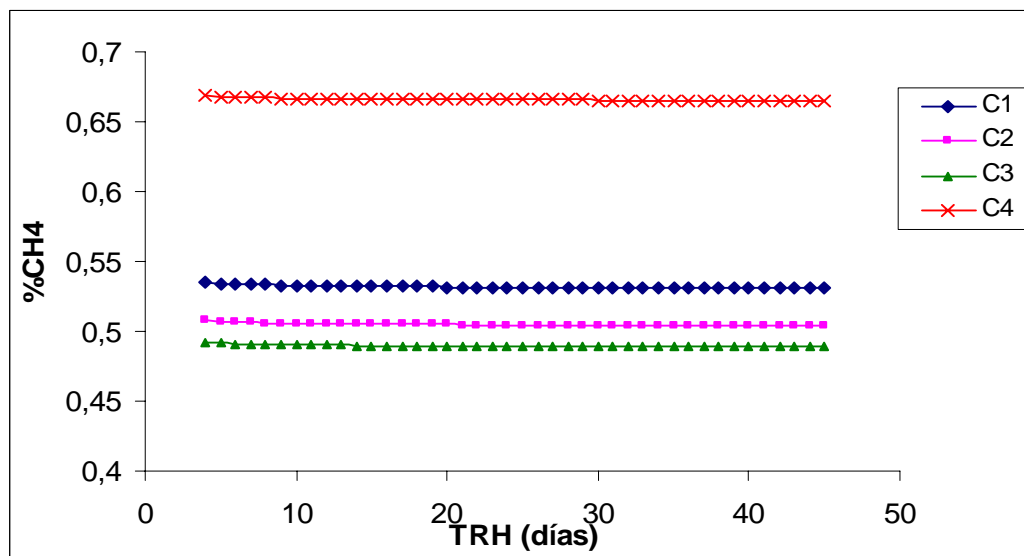
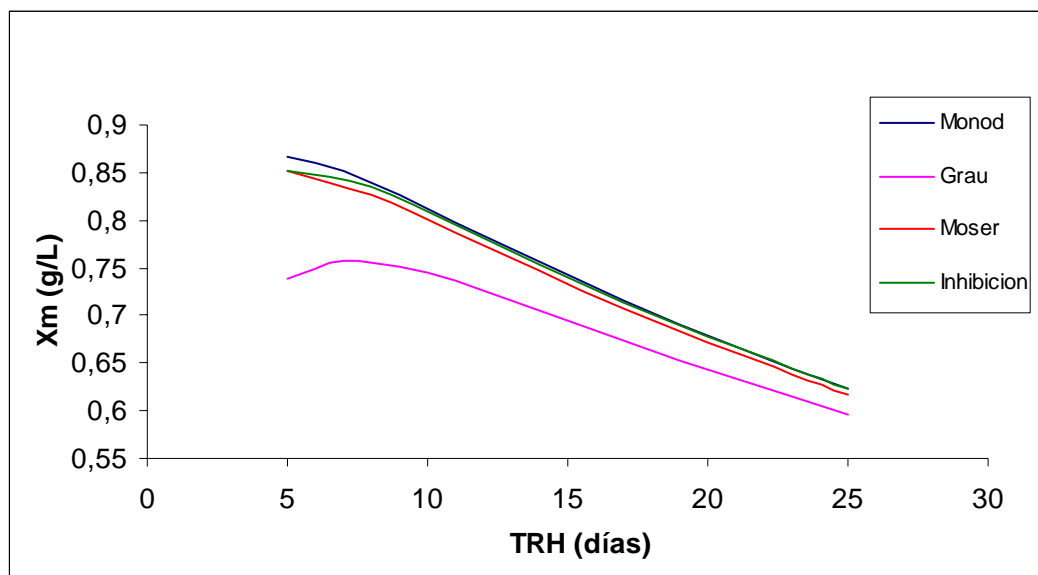


Figura 15. Porcentaje de metano contra el tiempo de retención hidráulico

Al variar el tiempo de retención hidráulico el porcentaje de metano presente en el biogás fluctúa levemente, porque como se observó en la grafica del análisis anterior al incrementarse el TRH el flujo volumétrico de entrada al digestor disminuye, por lo tanto el crecimiento de las bacterias es menor y la conversión del material orgánico a los productos presentes en el biogás es baja obteniéndose una transferencia al gas casi en las mismas proporciones volumétricas.

**3.1.7 Variación de la biomasa metanogénica contra el tiempo de retención hidráulico.** Este análisis se realiza para las diversas cinéticas que poseen las extensiones, así como para el modelo cinético de inhibición con todos los niveles de inhibición.

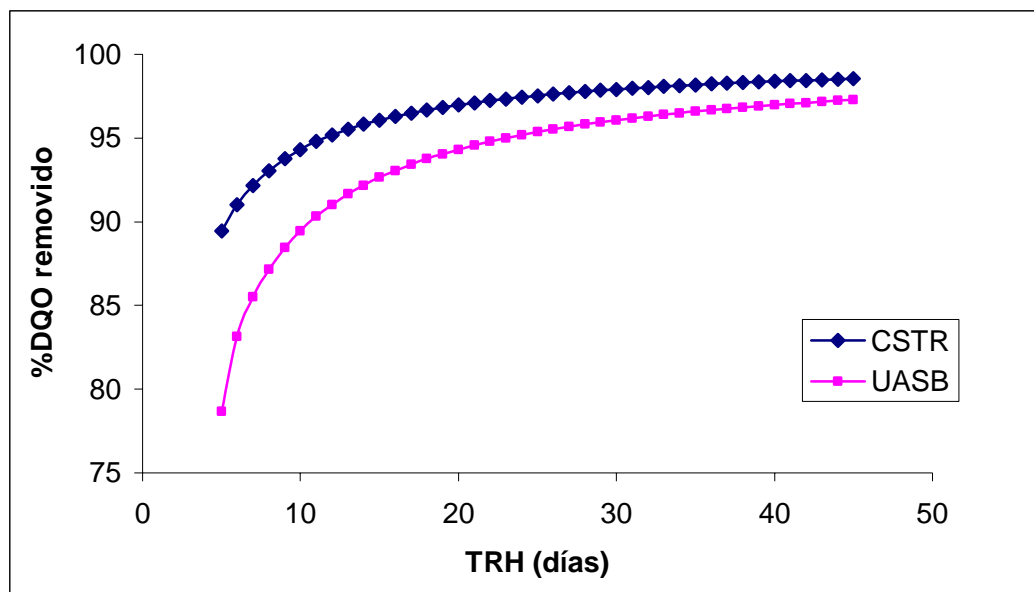


**Figura 16.** Biomasa metanogénica contra el tiempo de retención hidráulico

El comportamiento observado en el análisis es el decaimiento de la biomasa de acuerdo con cada modelo cinético. La variación que se observa es debido a la construcción del modelo y los parámetros que sobre él influyen. Para el modelo de inhibición multiplicativo de Monod se puede observar el efecto de

la inhibición en la concentración de las bacterias metanogénicas tal y como se reporta en la literatura que es el grupo trófico más sensible a las inhibiciones del sistema. Siendo el modelo de Monod el más utilizado para describir el proceso anaerobio dado que es el que mejor describe el comportamiento, se observa una amplia desviación de la cinética de Grau respecto a los otros tres modelos.

**3.1.8 Variación del porcentaje de remoción de DQO contra el tiempo de retención hidráulico.** Este análisis se realiza para observar la variación del porcentaje de DQO removido debido al tiempo de retención hidráulico y para los dos digestores anaerobios simulados.



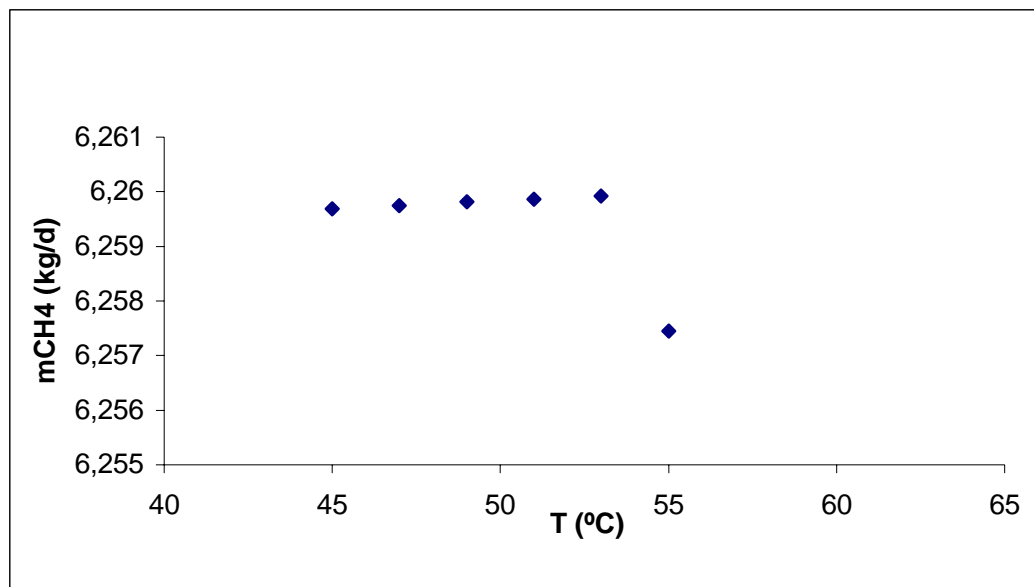
**Figura 17.** %DQO removido contra el tiempo de retención hidráulico para cada digestor anaerobio.

La figura muestra que la tasa de remoción de DQO es mas baja en el digestor anaerobio UASB, debido a que este equipo al poseer una región donde se ubica el manto de lodos y se lleva a cabo la hidrólisis reduce el volumen del reactor en donde se llevan a cabo las otras etapas del proceso

de digestión anaerobia por lo cual el tiempo de retención para estas etapas se reduce, presentándose una menor degradación del material orgánico.

Sin embargo, como se explicó anteriormente, se conserva la tendencia del incremento del porcentaje de remoción de la DQO a mayores tiempos de retención para los dos digestores.

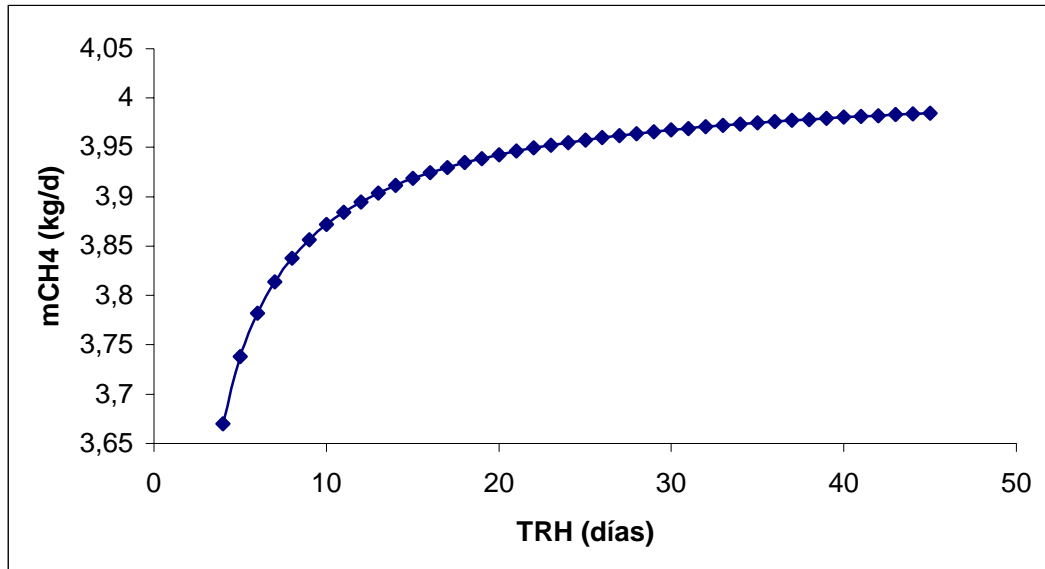
**3.1.9 Variación del flujo másico de metano contra la temperatura.** El análisis se realiza para un volumen de digestor de 1 m<sup>3</sup> y un tiempo de retención hidráulico de 20 días y para la concentración C1.



**Figura 18.** Flujo másico de metano contra temperatura

Como se puede observar para un proceso termofílico el flujo másico de metano se incrementa hasta una temperatura óptima después de la cual la producción empieza a decaer tal como se reporta en la literatura, debido a que las bacterias termofílicas trabajan en un rango de temperatura de 45-60°C, siendo el óptimo una temperatura de 53°C aproximadamente después de la cual la biomasa empieza a decaer.

**3.1.10 Variación del flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico.** El análisis se realiza para un caudal de entrada al digestor de 100 L/d y la concentración C1.



**Figura 19.** Flujo másico de metano contra el tiempo de retención hidráulico

A diferencia del análisis anterior, para un volumen fijo y variación del tiempo de retención, la producción de metano se incrementa a mayores tiempos de retención puesto que el volumen del digestor va variando aumentando su valor para cumplir el requisito de la entrada de flujo, de esta manera las bacterias tienen un volumen mayor para reproducirse y entrar en contacto con el sustrato. La actividad de las bacterias tiende a estabilizarse a mayores TRH, de esta manera el flujo másico de metano se incrementa levemente.

### **3.2 INTEGRACIÓN DE LA EXTENSIÓN A HYSYS**

La funcionalidad de las extensiones se observa mejor cuando se integran en un proceso con las operaciones unitarias presentes en HYSYS, para representar esto se realizaron dos casos de simulación en donde se integra

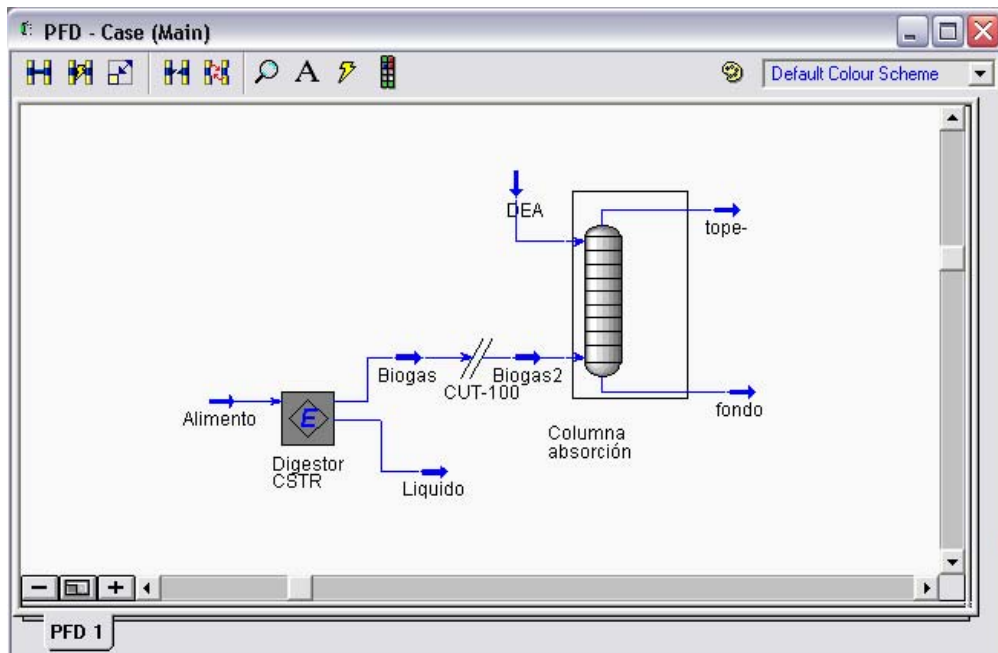
la operación de digestión anaerobia a un proceso de tratamiento y aprovechamiento del metano presente en el biogás.

El digester anaerobio se trabajó a temperatura termofílica, presión atmosférica, tiempo de retención hidráulico de 20 días y la caracterización del efluente tratado es la reportada en la tabla 8.

**3.2.1 Endulzamiento del biogás.** La composición del biogás resultante del proceso presenta la siguiente caracterización:

- Metano
- Dióxido de carbono
- Agua
- Ácido sulfhídrico

Aunque el ácido sulfhídrico es un gas altamente toxico la presencia de este ácido en el biogás es de concentraciones bajas (trazas), dándole un olor desagradable, además de poder crear problemas de corrosión en las tuberías, por estas razones se realiza un endulzamiento al biogás, el cual consiste en poner en contacto en una columna de absorción la corriente gaseosa del digester y una corriente con la presencia de una amina para lograr la remoción del ácido sulfhídrico del biogás.



**Figura 20.** Endulzamiento del biogás

La integración de la operación de digestión anaerobia con la columna de absorción se lleva a cabo y el simulador resuelve este conjunto de equipos bajo cualquier cambio de condiciones en alguno de ellos.

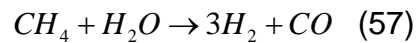
Luego de establecer las condiciones de la columna de absorción el sistema converge, los resultados obtenidos en el proceso se reportan en la tabla 9.

**Tabla 9.** Comparación de la corriente de gas a la entrada y salida del proceso de endulzamiento

COMPUESTO	CORRIENTES DE SALIDA	
	Digestor	Absorbedor
Metano	0,523977504	0,935895877
CO2	0,417360303	1,34E-04
H2O	5,85E-02	6,40E-02
H2S	1,16E-04	1,79E-25

A partir de los datos reportados de la corriente de salida de la operación de absorción se puede observar que al biogás se le ha retirado prácticamente todo el ácido sulfhídrico que traía del proceso de la digestión anaerobia.

**3.2.2 Utilización del metano.** Una vez se ha retirado el ácido sulfhídrico del biogás a través del proceso de endulzamiento, el metano presente en el gas se puede disponer para diversos procesos, en este caso la corriente se lleva a un reactor donde se establece una reacción de producción de hidrogeno.



La operación unitaria utilizada para llevar a cabo la reacción es un reactor de conversión, el cual se integra al proceso tomando para la operación la corriente gaseosa que abandona la columna de absorción.

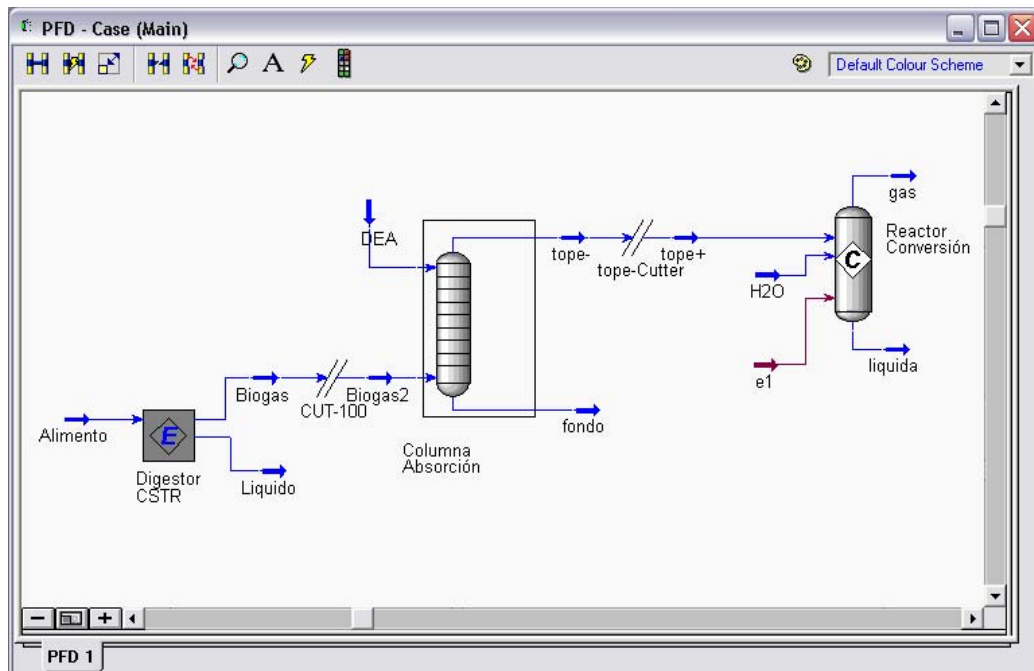


Figura 21. Proceso de conversión de metano a hidrogeno

Se conecta al reactor una corriente de agua para llevar a cabo la reacción, se fija una conversión del 90% para la reacción, los resultados de la operación se muestran en la tabla 10.

**Tabla 10.** Composición molar de las corrientes del reactor de conversión

COMPUESTO	CORRIENTES VINCULADAS AL REACTOR			
	H2O	tope+	liquida	gas
Metano	0	0,83130245	3,63E-02	2,35E-02
CO2	0	1,19E-04	3,95E-04	3,37E-05
H2O	1	0,16857837	0,736851443	0,12995456
Hidrogeno	0	0	7,04E-03	0,63487342
CO	0	0	0,219378772	0,21162447

## CONCLUSIONES

Se conformó un modelo matemático para describir el proceso biológico de digestión anaerobia, que comprende la caracterización del efluente a través de los componentes orgánicos principales, las cinéticas de los grupos tróficos, dependencia de la temperatura de los parámetros cinéticos y constantes de disociación y suministra la composición de la corriente líquida, la caracterización de la biomasa en cada grupo trófico y la composición del biogás.

El módulo de digestores anaerobios se integro con los métodos del simulador HYSYS 3.1. Los digestores simulados pueden interactuar con las operaciones unitarias existentes en el ambiente de HYSYS para conformar un proceso de tratamiento y aprovechamiento de los efluentes de los digestores, en especial a la corriente de biogás para la utilización del metano resultante del proceso.

Los modelos cinéticos de Monod, Grau y Moser permiten describir el comportamiento microbiano de acuerdo con los parámetros cinéticos establecidos por cada autor, presentándose para el modelo cinético de inhibición que muestra la interacción que ocurre al interior del proceso entre los diferentes tipos de sustrato reportando las tendencias esperadas en la literatura.

El módulo es un aporte como herramienta educativa para la operación y diseño del proceso de digestión anaerobia, a través del análisis de los diversos comportamientos obtenidos a partir de los modelos cinéticos y tipos de digestores incluidos en las extensiones, además de potencializar el simulador HYSYS ya que no presenta este tipo de operación unitaria.

## RECOMENDACIONES

- ❖ Mejorar el diseño de los digestores a través del análisis y depuración de las extensiones y en lo posible incluir el estado dinámico.
- ❖ Continuar este tipo de proyectos por la amplia versatilidad que ofrece HYSYS para el manejo de las extensiones creadas y la posibilidad de integrar estas en un proceso con los equipos existentes en HYSYS.
- ❖ Modelar y simular el efecto de la regulación del hidrógeno en el proceso de la digestión anaerobia.

## BIBLIOGRAFIA

ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. 1993. A mathematical model for dynamic imulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and Bioengineerig* 42: 159-166.

ANGELIDAKI, I, Ellegaard, L y Ahring, B. 1999. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and Bioengineerig* 63: 363-372.

ANGELIDAKI, I, Ahring B. 2003. Applications of the Anaerobic Digestion Process Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology. 82 : 1 – 33.

BAILEY, James y OLLIS, David. *Biochemical Engieneering Fundamentals*. McGraw-Hill. Pp. 343-349. (1977).

BATSTONE, D, Keller J. 2000. Modelling Anaerobic Degradation of Complex Wastewater. I: Model Development. *Bioresource Technology* 75: 67 – 74.

BATSTONE, D, Keller, J, Angelidaki, I, Kalyuzhnyi, S, Pavlostathis, S, Rozzi, A. (2002). The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology* 45: 65-73.

BREURE AM, Mooijman KA, van Andel JG. 1986. Protein degradation in anaerobic digestion: Influence of volatile fatty acids and carbohydrates on hydrolysis and acidogenic fermentation of gelatin. *Appl Microbiol Biotechnol* 24:426–431.

BURGOS, C. y Pradilla, M. Biorreactores. Versión 2.0.0. Universidad Nacional de Colombia. Sede Bogotá. 1999.

GAVALA, H y Angelidaki I (2003). Kinetics and modeling of aerobic digestion process. *Advances Biochemical Engineering/Biotechnology* 81: 58 – 93.

HANAKI K, Matsuo T, Nagase M. 1981. Mechanisms of inhibition caused by long chain fatty acids in anaerobic digestion process. *Biotechnol Bioeng* 23:1591–1610.

LEVIN, M. y Gealf, M. Biotratamiento de Residuos Tóxicos y Peligrosos: Selección, Estimación, Modificación de Organismos y Aplicación. McGrawHill. 1997.

MUSSATI, M, Aguirre P y Scenna N (1998). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. Capítulo XVIII, 697.

MUSSATI, M, Aguirre P y Scenna N (1998). Modeling of real biological reactors for the treatment of complex substrates. Dynamic simulation. *Computers Chem. Engng.* 22: S723-S726.

PAVLOSTATHIS, S.G y Giraldo-Gomez, E. (1991). Kinetics of anaerobic treatment. *Water Science and Techonology* 24: 35-59.

PALMISANO, A. y Barlaz, M. Anaerobic Digestion of Municipal Solid Wastes. (2003, Diciembre).

PIND, P, Angelidaki I, Ahring B. 2003. Monitoring and Control of Anaerobic Reactors *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology.* 82 : 137 – 182.

RITTMANN, McCarty. *Biotecnología del medio ambiente*. 2001

SCHAUDER R, Schink B. 1989. *Anaerovibrio glycerini* sp. nov., an anaerobic bacterium fermenting glycerol to propionate, cell matter, and hydrogen. *Arch Microbiol* 152:473–478.

SEGHEZZO, L. 2004. *Anaerobic Treatment of Domestic Wastewater in Subtropical Regions*. Thesis Wageningen, University, The Netherlands. P 14

## ANEXO A. MODELOS DE LA DIGESTIÓN ANAEROBIA

Diagrama del modelo de Hill y Barth 1977.

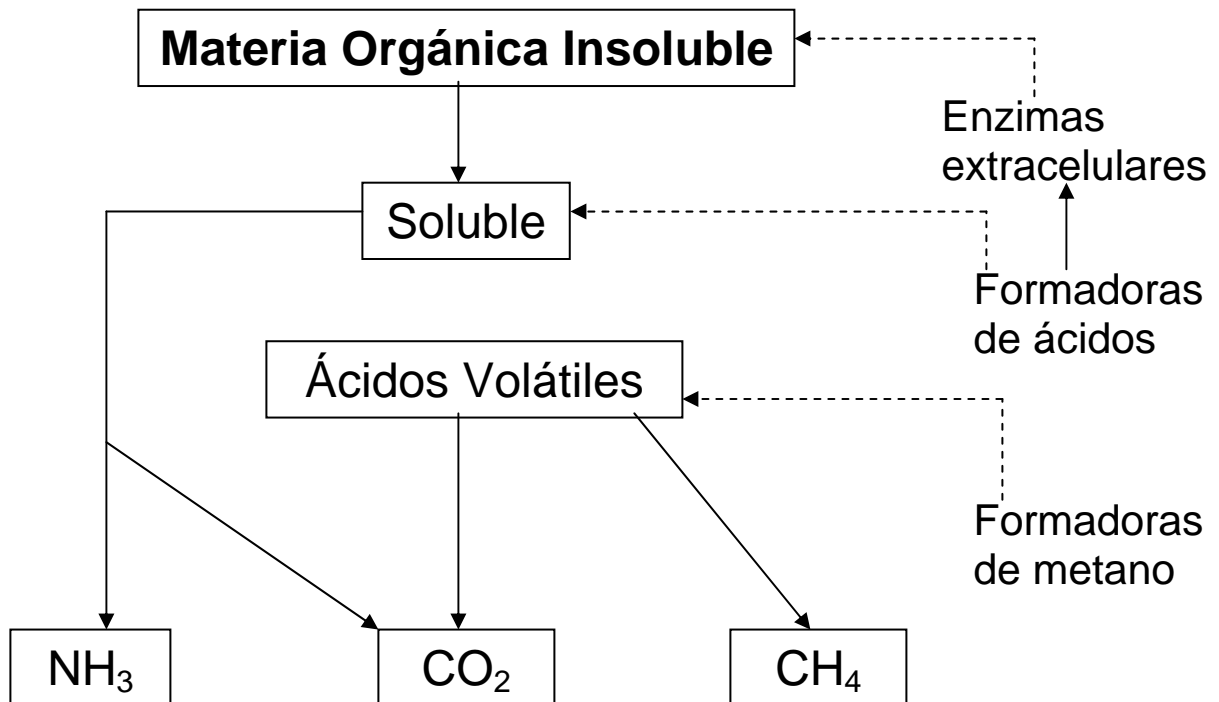


Figura 22. Modelo de digestión anaerobia de Hill y Barth

Diagrama del modelo de Moletta 1986.

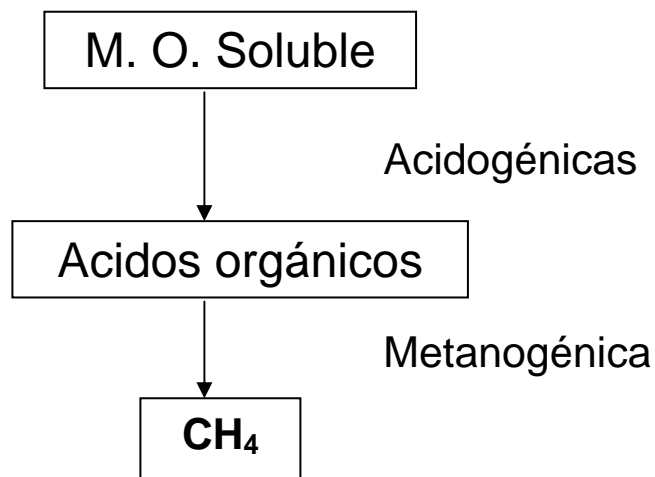
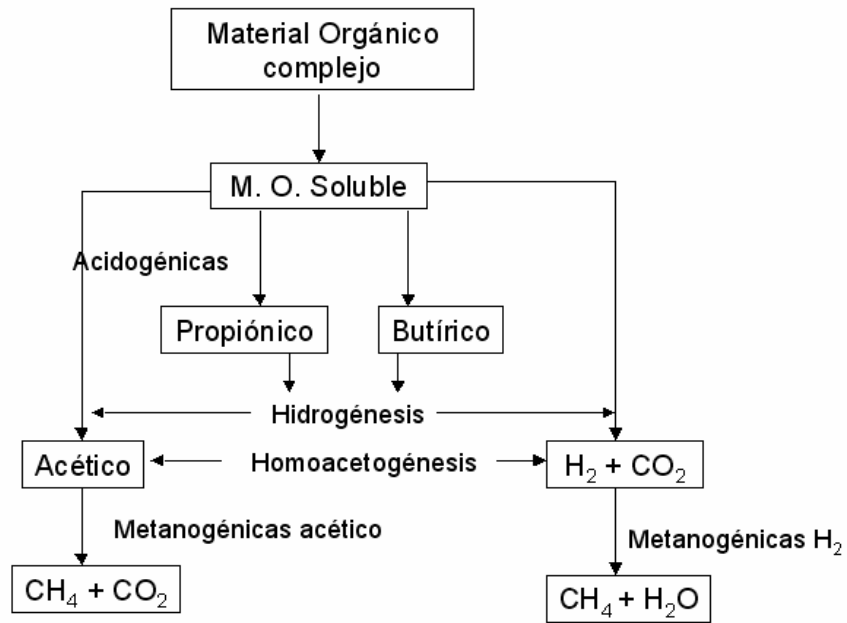


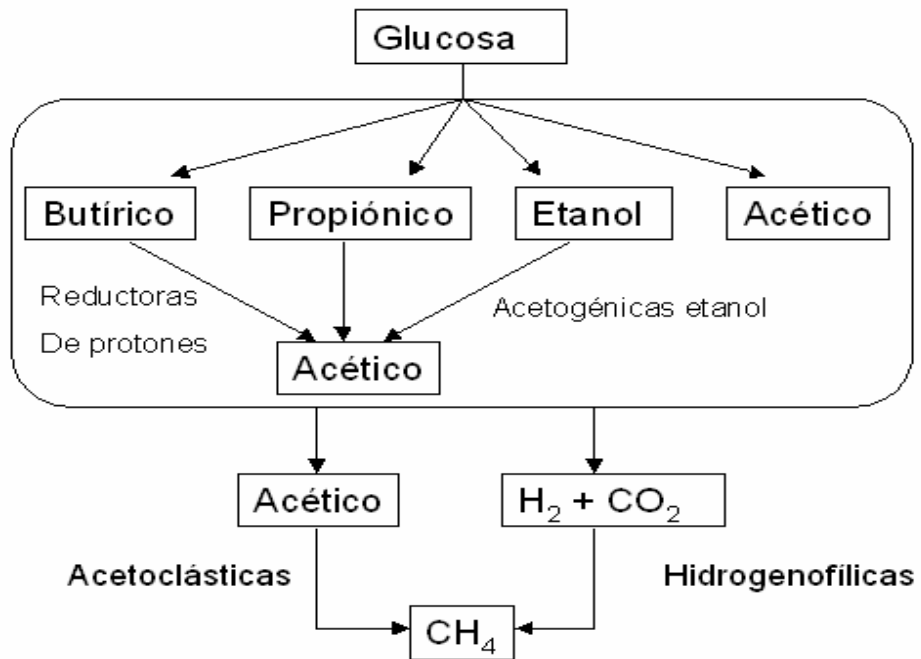
Figura 23. Modelo de digestión anaerobia de Moletta

**Diagrama de Hill 1982.**



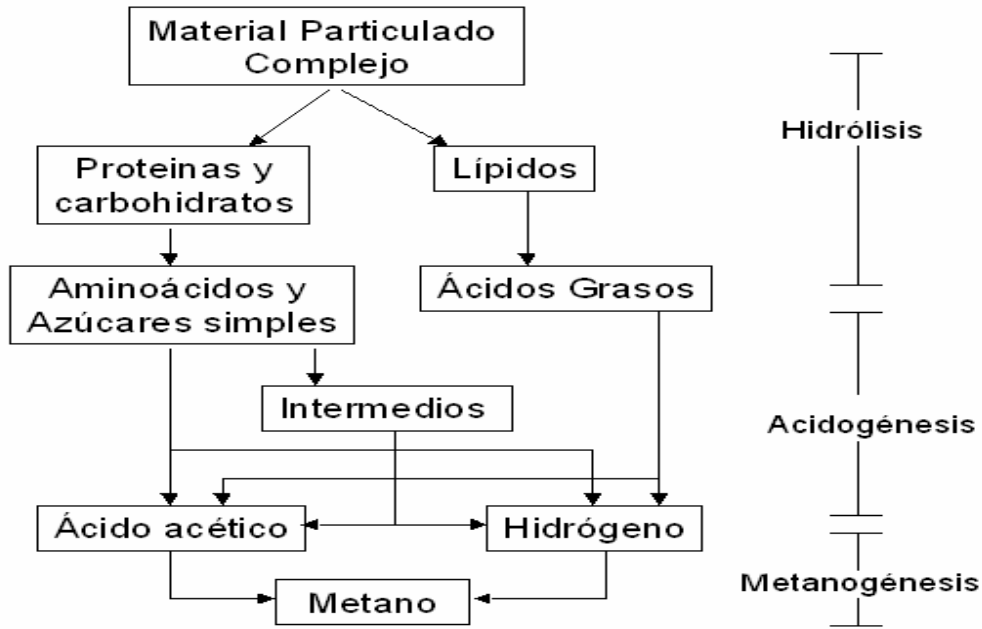
**Figura 24.** Modelo de digestión anaerobia de Hill

**Diagrama del modelo de Kalyuzhanyi 1997.**



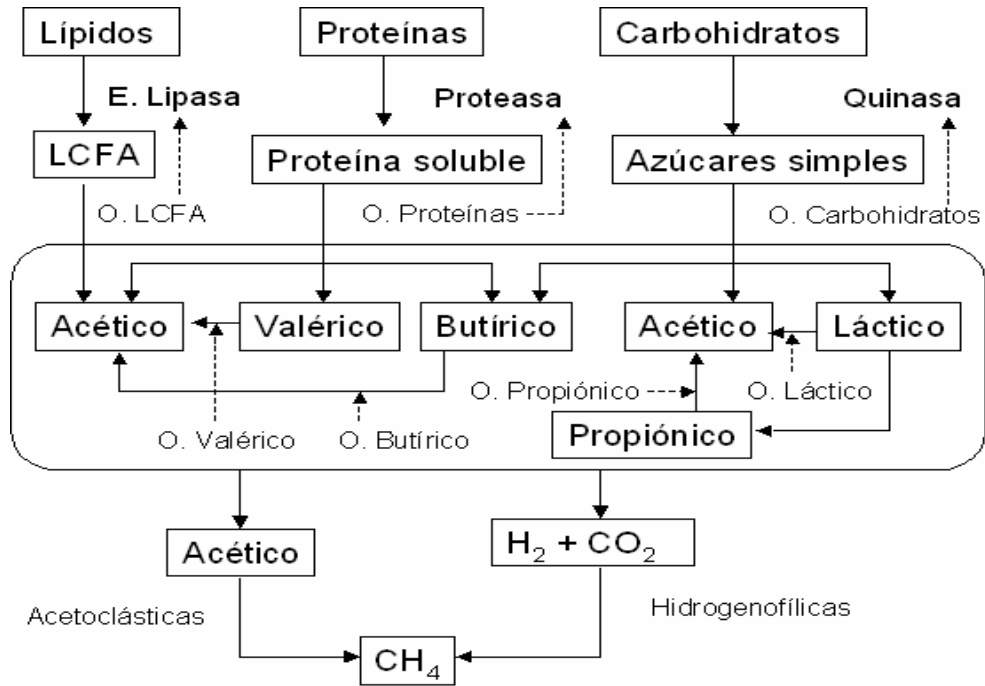
**Figura 25.** Modelo de digestión anaerobia de Kalyuzhanyi

**Diagrama del modelo de Bryers 1985.**



**Figura 26.** Modelo de digestión anaerobia de Bryers

**Diagrama del modelo de Batstone 2000.**



**Figura 27.** Modelo de digestión anaerobia de Batstone

### Diagrama del modelo ADM N°1

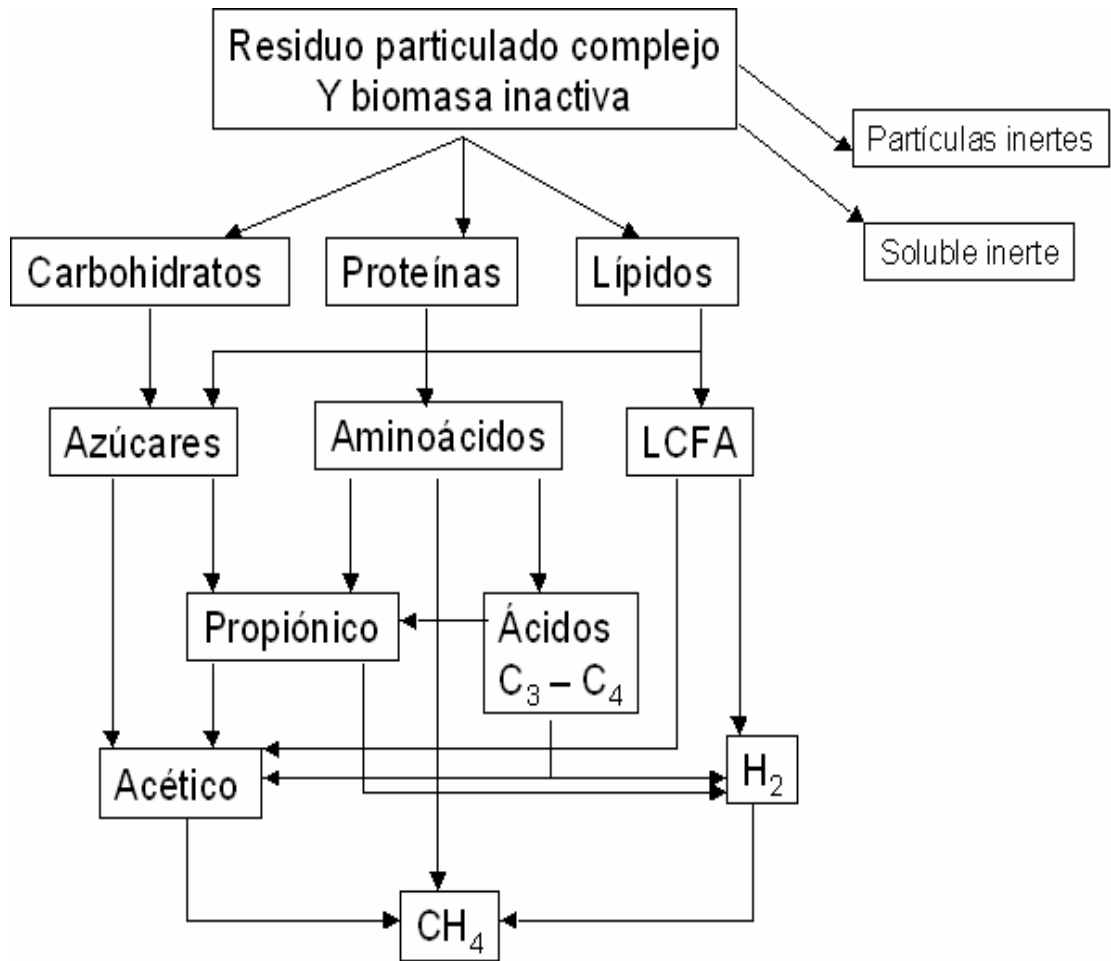


Figura 28. Modelo de digestión anaerobia ADM1

## ANEXO B. INTERFAZ DE LA EXTENSION

**Interfaz de la extensión (EDF).** La interfaz de la extensión vista en HYSYS es creada a través del Extension View Editor, este es el punto para declarar y almacenar variables, es decir, el archivo EDF es la conexión entre el código elaborado en Visual Basic para la operación (DLL) y el entorno de trabajo en HYSYS.

La construcción de la interfaz involucra dos aspectos importantes, los cuales son el desarrollo de las vistas de los equipos y la conexión al archivo de código, así como la definición de las variables que están asociadas a la extensión. Esto se realiza a través del Objects Manager y el Views Manager explicados a continuación.

**Objects Manager (Director de objetos).** En esta vista se ingresa información para el correcto funcionamiento de la extensión. Esta información es usada para registrar la extensión apropiadamente y para declarar variables y objetos utilizados por la extensión.

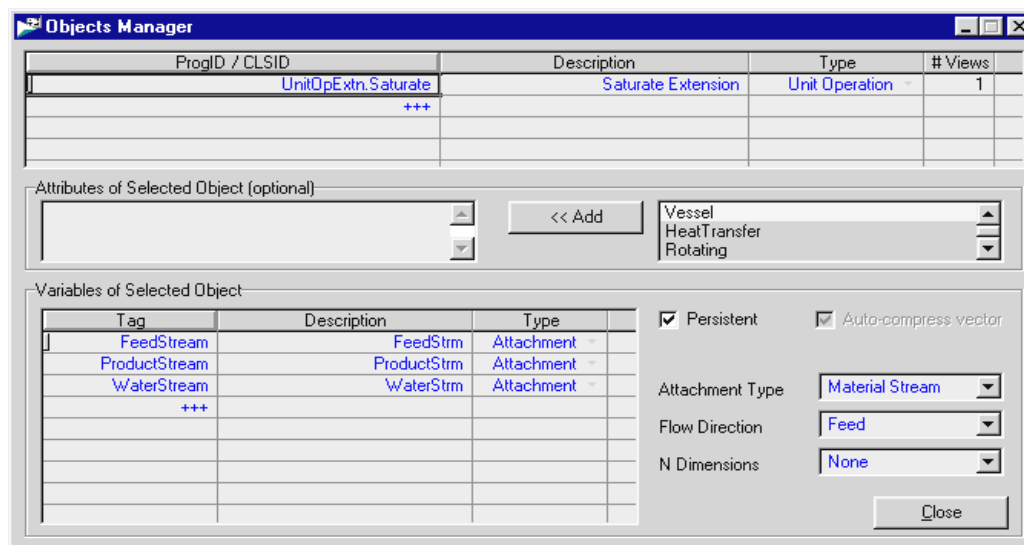


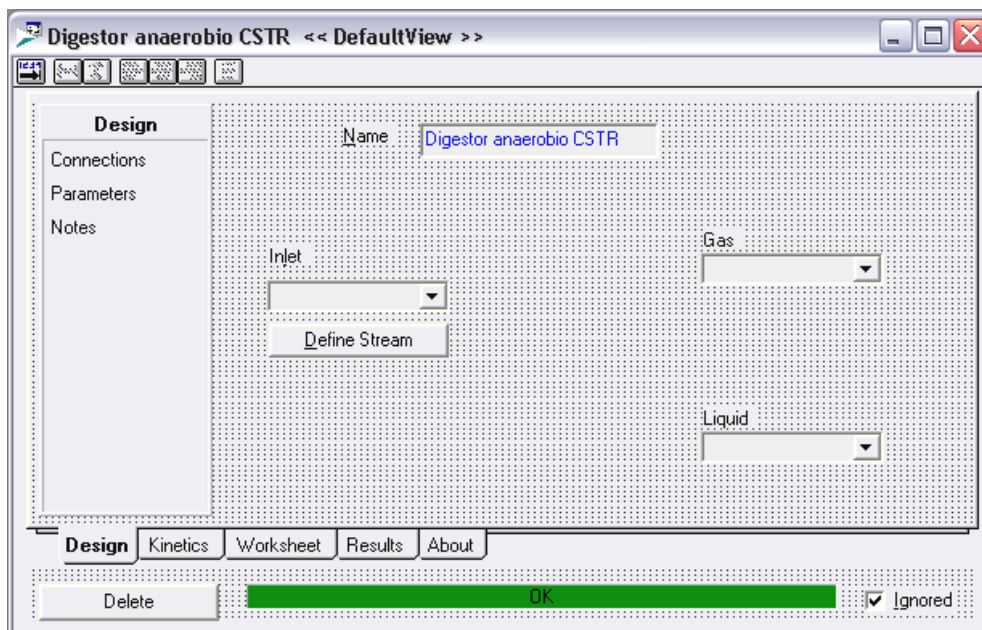
Figura 29. Director de objetos del Extension View Editor.

El Objects Manager consta de dos secciones importantes para el desarrollo de las extensiones:

- La definición del objeto.
- Las variables del objeto.

La descripción de estas secciones se muestra en el Anexo B.

**Views Manager (Director de vistas).** En esta parte se realiza la creación de las vistas asociadas con la extensión, el entorno de trabajo es similar al entorno de Visual Basic y en esta parte se vinculan las variables con los elementos de cada vista para establecer la conexión entre HYSYS y el código de la extensión.



**Figura 30.** Director de vistas del Extension View Editor.

### **Definición del objeto**

Para la definición del objeto se debe establecer la conexión de la interfaz con el archivo de código, esto se realiza declarando el nombre de la DLL

vinculada a este objeto bajo el mismo nombre que esta en el registro y es usada por HYSYS para acceder al respectivo archivo DLL.

De igual manera se debe especificar el tipo de extensión que se está llevando a cabo, para nuestro caso la extensión es de tipo operación unitaria, se puede contar con otro tipo de extensiones como son:

- Reacciones cinéticas
- Paquetes de propiedades

### **Variables del objeto**

En esta zona se pueden crear variables que se relacionan con el archivo DLL especificado en la definición del objeto, esto es, variables que van suministrar información entre el archivo de código y el simulador HYSYS 3.1. Además estas variables se pueden vincular a los objetos sobre las vistas del equipo.

#### *Declaración de variables*

La declaración de las variables se asemeja a cualquier otro software de programación, estableciendo un nombre para la variable y seleccionando el tipo de variable que se esta definiendo, para esto el Extension View Editor las clasifica en cinco tipos:

- Real number
- Enumeration
- Text
- Message
- Attachment

Las variables de tipo Attachment se declaran para representar las corrientes que se vinculan al equipo.

### *Propiedades de las variables*

Las variables declaradas poseen además las siguientes propiedades esenciales para el desarrollo de la herramienta ya que le brindan a la interfaz características que asemejan su funcionamiento al de cualquier operación existente en el simulador.

Entre las más importantes y que caracterizan el software por darle atributos especiales a las variables están:

La propiedad Persistent si es habilitada permite que la variable conserve su valor una vez se ha salvado el caso de simulación, esta disponible para todas las variables excepto Message.

La propiedad Trigger solve esta disponible para las variables de tipo Real number o Enumeration. Cuando esta habilitada se usa para recalculan el valor de la variable cuando este ha cambiado, realizando nuevamente todo el proceso de cálculo definido para la extensión.

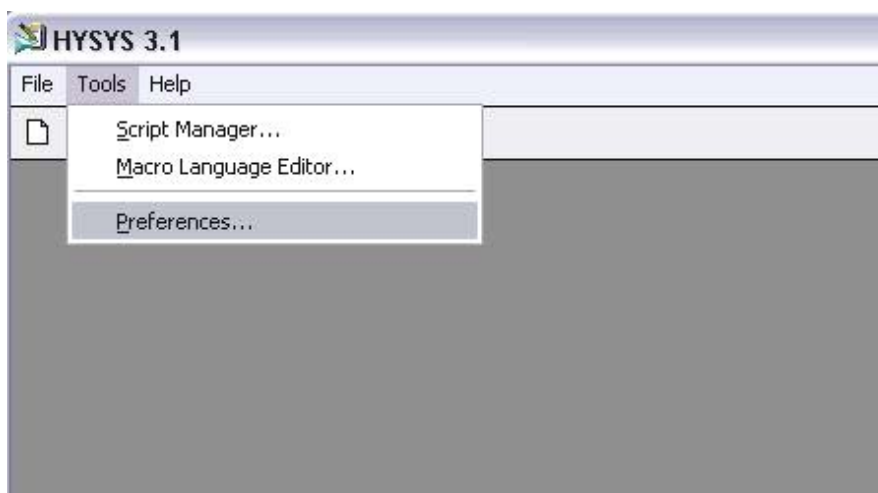
La propiedad Numeric Type se usa para especificar un tipo de unidad para las variables Real Number. Esta opción garantiza que el valor apropiado aparece en la vista de acuerdo a las unidades especificadas por el usuario, esta propiedad permite asemejar el entorno del equipo a los existentes en HYSYS.

## ANEXO C. INTRODUCCIÓN A LAS EXTENSIONES

Las extensiones realizadas se comportan en el ambiente de HYSYS como cualquier otra operación presente, pero antes de poder usar los equipos en el simulador se deben registrar los archivos sobre los cuales se crearon las extensiones.

### Registro del modulo

La construcción del código creado en Visual Basic para el módulo a la par con su archivo de integración al ambiente del simulador deben ser registrados a través del menú herramientas (Tools) y luego en las preferencias de la sesión.



**Figura 31.** Menu Tools del simulador HYSYS 3.1

una vez ubicados en este cuadro de diálogo, se busca la pestaña extensiones donde se realiza el registro del archivo DLL el cual debe estar ubicado en la misma carpeta con el archivo EDF

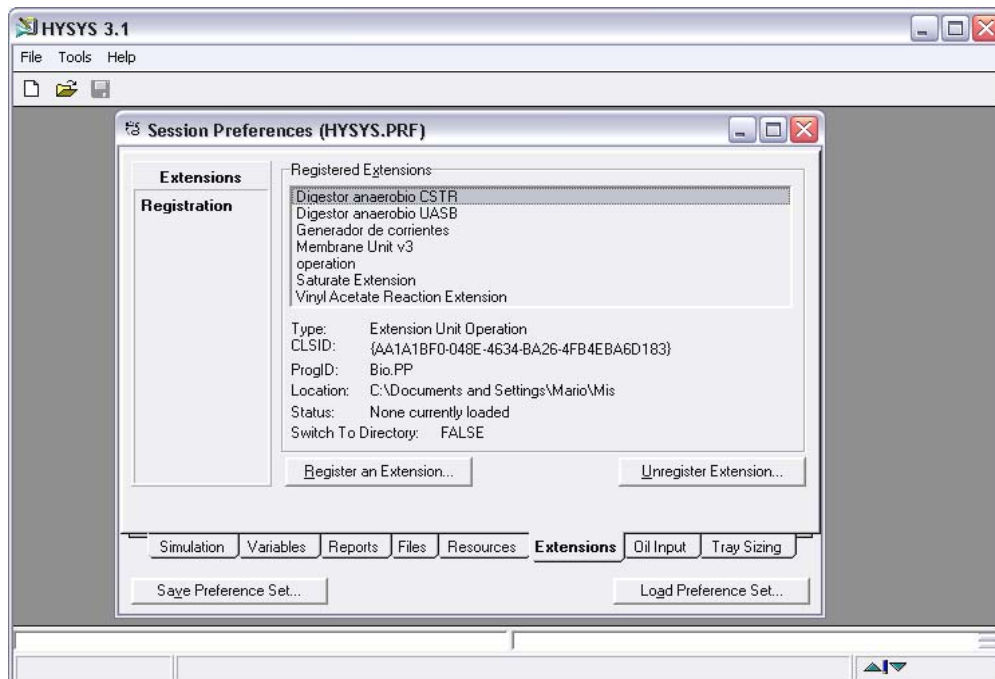


Figura 32. Preferencias de la sesión del simulador HYSYS 3.1

### Llamado de los equipos al entorno de HYSYS

Los equipos al ser creados como una extensión no se encuentran en la paleta normal de HYSYS a diferencia de los equipos que el simulador trae, por esta razón su inclusión al PFD, debe realizarse a través del flowsheet y el comando “add operation” o a través de la tecla de ingreso rápido F12, al ingresar en este campo aparece una ventana que muestra todas las operaciones unitarias que se pueden usar en el caso, para integrar nuestros equipos nos ubicamos en la opción extensiones y seleccionamos el nombre de la extensión para continuar con su carga al caso de simulación. Una vez realizada la carga de la extensión se puede iniciar el trabajo con esta como con cualquier otra operación existente en HYSYS.

## ANEXO D. DESCRIPCION DE LOS EQUIPOS

Los equipos que se vincularán al simulador HYSYS 3.1 a través del modulo desarrollado tendrán la siguiente estructura, la cual es similar para las dos extensiones.

En la vista general aparece un botón de Delete el cual borra la operación del caso de simulación activo de HYSYS, se encuentra también una barra de estado donde aparece la información requerida para el funcionamiento de la operación, además de un CheckBox para la opción de ignorar la operación en el caso de simulación.

Las extensiones cuentan con cinco paletas de selección:

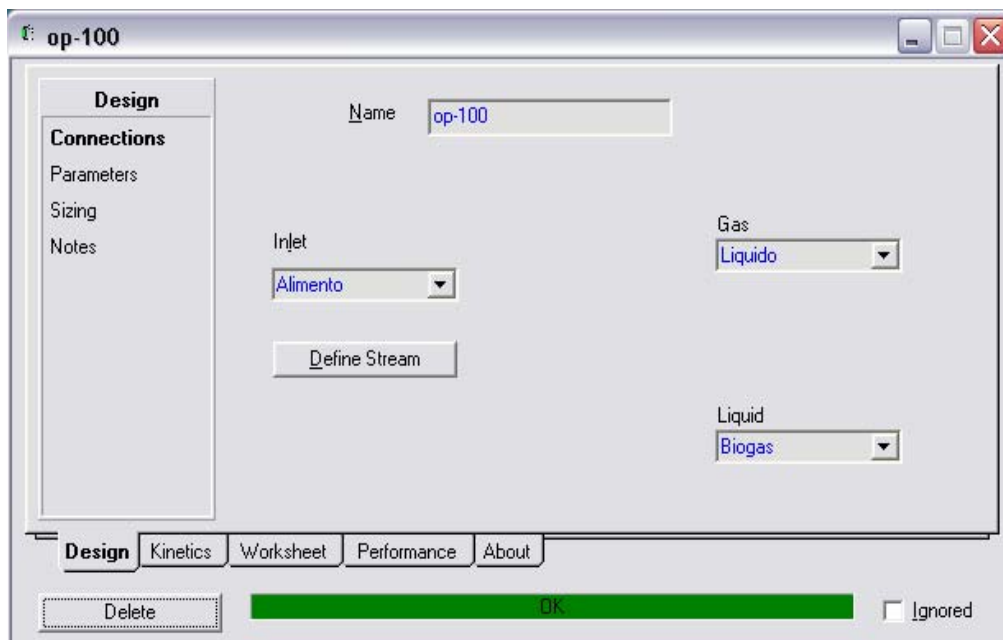
- Design.
- Kinetics.
- Worksheet.
- Performance.
- About.

En estas paletas se define información para la operación o se muestran los resultados de la operación como se especificara a continuación.

### **DISEÑO (DESIGN)**

La paleta Design es utilizada para la entrada de datos necesarios para la operación y posee un submenú especificado por las etiquetas:

- Connections
- Parameters
- Sizing
- Notes



**Figura 33.** Vista Diseño del equipo

**Connections:** En esta etiqueta se especifican las corrientes que se conectan al equipo; una corriente de entrada la cual a través del botón “DefineStream” se puede establecer su composición y dos corrientes de salida, una de gas y otra de líquido, además se presenta el nombre del equipo.

**Parameters:** Esta etiqueta se refiere a parámetros del digestor y condiciones de operación, entre los cuales se encuentran, el volumen del digestor, la caída de presión y el tiempo de retención hidráulico.

**Sizing:** Esta etiqueta presenta una ayuda para el dimensionamiento del digestor partiendo del volumen establecido en la etiqueta Parameters.

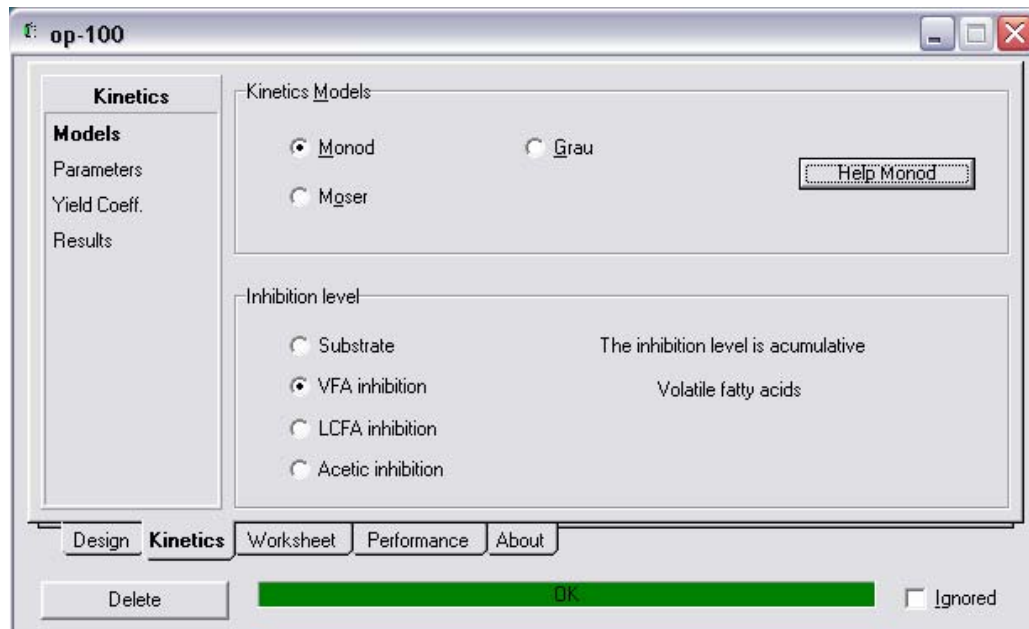
**Notes:** Este es un espacio para escribir anotaciones referentes al equipo y es característico de todos los equipos de HYSYS.

Para el digestor anaerobio UASB en la etiqueta parámetros se tiene la opción de fijar el porcentaje de volumen del digestor donde se va a llevar a cabo la hidrólisis del proceso.

### **CINETICAS (KINETICS)**

En la paleta Kinetics se dispone de varias cinéticas para llevar a cabo la operación, también se encuentra información acerca del proceso de digestión anaerobia la cual se puede variar si el usuario posee la información, el submenú esta compuesto por:

- Models
- Parameters
- Yield Coefficients
- Results



**Figura 34.** Vista Cinéticas del equipo

**Models:** En esta etiqueta se presentan los diferentes modelos cinéticos establecidos en la extensión:

- Modelo de Monod.
- Modelo de Grau.
- Modelo de Moser.

Para el modelo de Monod se activa una opción donde se especifica los niveles de inhibición para este modelo.

Se dispone de un botón que despliega una ventana de ayuda acerca de cada cinética.

**Parameters:** Esta etiqueta dispone de información sobre los parámetros cinéticos para cada tipo de biomasa o grupo trófico, en esta opción se encuentra un botón que reestablece los valores por defecto de los parámetros.

**Yield Coefficients:** En esta etiqueta se presentan los coeficientes de rendimiento establecidos para la operación de digestión anaerobia.

**Results:** Esta etiqueta registra las velocidades de utilización de los compuestos involucrados en el proceso.

### **CORRIENTE DE TRABAJO (WORKSHEET)**

En esta paleta se registra información sobre las corrientes de entrada y salida de los equipos, el submenú está compuesto por:

- Conditions
- Composition

The screenshot shows a software window titled 'op-100' with a 'Worksheet' tab selected. The window contains a table with the following data:

	inlet	2	agua
CO2	0.00541468	0.42604765	0.00013083
H2O	0.96452046	0.14122173	0.98457594
Methane	0.00000000	0.43262128	0.00000701
lípidos*	0.00023363	0.00000000	0.00000023
Ammonia	0.01214658	0.00000000	0.01281498
H2S	0.00000000	0.00010935	0.00000011
AceticAcid	0.00427135	0.00000000	0.00003716
proteína*	0.00000000	0.00000000	0.00002164
n-C4oicAcid	0.00009391	0.00000000	0.00003386
C3oicAcid	0.00178710	0.00000000	0.00007821
n-C5oicAcid	0.00000000	0.00000000	0.00002834
OleicAcid	0.00000000	0.00000000	0.00000142
Dextrose	0.00234232	0.00000000	0.00001656
Sucrose	0.00693753	0.00000000	0.00051325
Insproteína*	0.00225244	0.00000000	0.00016664

At the bottom of the window, there are tabs for 'Design', 'Kinetics', 'Worksheet', 'Performance', and 'About'. Below the tabs are buttons for 'Delete', 'OK', and 'Ignored'.

Figura 35. Vista Corriente de trabajo del equipo

**Conditions:** Esta etiqueta despliega las condiciones de las corrientes conectadas al equipo.

**Compositions:** La etiqueta compositions muestra las composiciones tanto de la corriente de entrada como de las dos corrientes de salida, las composiciones se dan en fracción molar.

### **FUNCIONAMIENTO (PERFORMANCE)**

En esta paleta se registra información específica resultado de la operación realizada por el equipo, así como estimativos teóricos, el submenú esta compuesto por:

- Hydrolysis
- Oxygen Demand
- Biomass Characterization
- Results

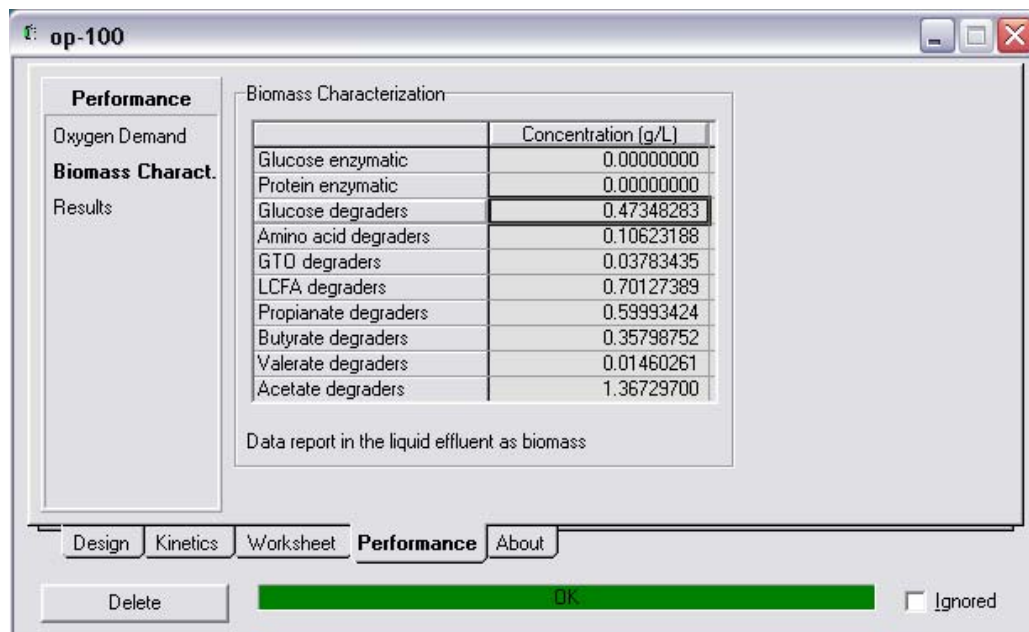


Figura 36. Vista Funcionamiento del equipo

**Hydrolysis:** Esta etiqueta se encuentra disponible únicamente para el digester anaerobio UASB y en ella se reporta el estado de la etapa hidrolítica, mostrando los valores a la entrada y salida del digester de los compuestos insolubles.

**Oxygen Demand:** En esta etiqueta se publican los valores teóricos calculados para la demanda biológica y química de oxígeno en las condiciones de entrada y salida y el porcentaje teórico de remoción.

**Biomass Characterization:** Se muestran valores detallados de la biomasa especificando la concentración de cada grupo de bacterias que actúan en el proceso de la digestión anaerobia descrito, estas son:

- Degradadoras de glucosa
- Degradadoras de aminoácidos
- Degradadoras de lípidos (GTO)

- Degradadoras de oleato (LCFA)
- Degradadoras de propianato
- Degradadoras de butirato
- Degradadoras de valerato
- Degradadoras de acetato

**Results:** En este apartado se muestran otros resultados del proceso como son el valor de pH, los sólidos suspendidos y los sólidos totales.

### ABOUT

En este apartado se brinda información acerca de los creadores de la extensión, las personas que colaboraron a su desarrollo y la versión de la extensión.

Además de la interfaz principal de las extensiones, cada equipo cuenta con las vistas del “DefineStream” que se utilizan para definir la corriente de entrada al digestor.

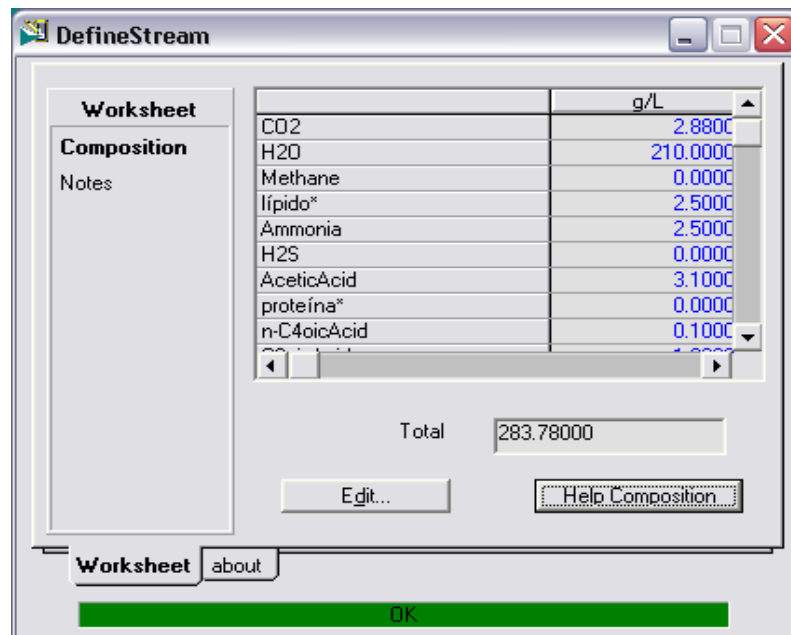
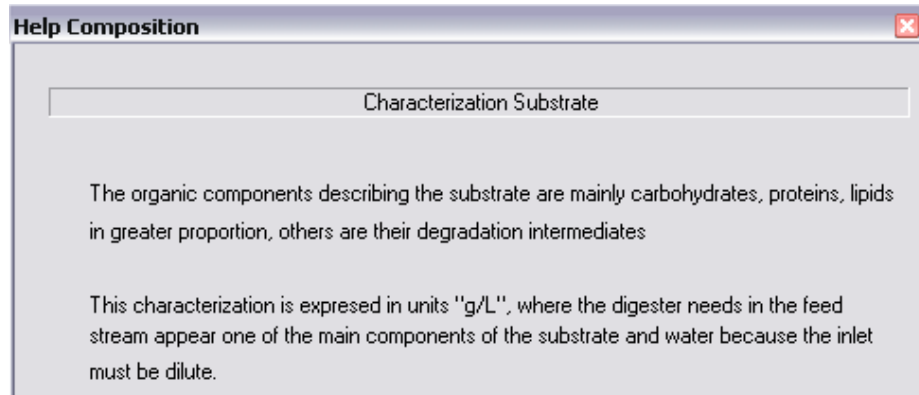


Figura 37. Vista Definición de corriente del equipo

También se estableció en las vistas de las extensiones botones de ayuda los cuales abren ventanas con información acerca del tema en la región donde se está explorando el equipo.



**Figura 38.** Vista de ayuda

## **ANEXO E. FUNCIONAMIENTO DE LOS EQUIPOS**

El funcionamiento de los equipos CSTR y UASB es similar por esto se hará una sola descripción para entender el manejo de los dos, especificándose cualquier característica especial de cada equipo.

### **Condiciones para la operación del equipo**

Los equipos requieren para brindar una solución, cuatro condiciones esenciales de entrada, las cuales son tres corrientes vinculadas al equipo (alimento, salida gas y líquido) y además el valor de un parámetro ya sea el tiempo de retención hidráulico o el volumen del digestor, los demás datos necesarios para realizar los cálculos de la operación están establecidos al realizar la carga de la extensión, aunque estos se pueden ingresar también por el usuario, estos son: el modelo cinético, los parámetros utilizados en el modelo y los coeficientes de rendimiento y para el digestor anaerobio UASB el porcentaje de volumen del equipo para la etapa de la hidrólisis.

### **Definición de la corriente de entrada**

La corriente de entrada debe estar completamente definida y en su caracterización se debe ingresar alguna composición del material orgánico representado a través de sus componentes principales:

- Carbohidratos Insolubles
- Lípidos
- Proteína Insoluble

Puesto que el equipo va a trabajar sobre digestión anaerobia de material orgánico lo cual hace necesario que se presenten estos tres grupos o al menos uno de ellos.

Sin embargo el digestor anaerobio CSTR cuenta con la posibilidad de trabajar sin la entrada de los componentes principales, saltando la etapa de

la hidrólisis y trabajar directamente a partir de la etapa de la acidogénesis a través de la entrada de carbohidratos o proteínas solubles definidas en la corriente de entrada al digestor.

En la definición de la corriente también será necesaria la presencia de agua puesto que la corriente de alimento a trabajar en los digestores anaerobios consta de material orgánico diluido ya que el agua es el medio de transporte del proceso de la digestión anaerobia.

### **Definición de la corriente de entrada a través de “DefineStream”**

La convención normal en la que se reportan datos de la caracterización del sustrato para un digestor anaerobio es en concentraciones de gramos por litro, por esta razón el equipo posee un botón llamado “DefineStream” el cual abre una vista que recibe los valores de concentración en estas unidades para cada componente y define la corriente de alimento a través de los datos ingresados.

### **Modelos y parámetros de trabajo**

Las condiciones establecidas que se pueden variar por el usuario se encuentran en la etiqueta Kinetics del equipo, estas son las cinéticas utilizadas para describir el comportamiento del consumo de sustrato, los parámetros cinéticos para cada grupo trófico y los coeficientes de rendimiento.

#### *Modelos*

Las cinéticas presentes para describir el comportamiento del consumo de sustrato son:

- Monod.
- Grau.
- Moser.

La cinética de Monod es la única donde se puede especificar el nivel de inhibición e inicialmente esta seleccionada para presentar valores sin inhibición, las otras opciones presentes son:

- Inhibición por VFA. (Ácidos Grasos Volátiles)
- Inhibición por LCFA. (Ácidos Grasos de Cadena Larga)
- Inhibición por Ácido Acético

La extensión cuenta con ayudas que brindan información acerca de cada una de las cinéticas, mostrando la definición de cada uno de sus parámetros, así como las unidades en que se deben ingresar sus valores.

#### *Parámetros de los grupos tróficos*

Las extensiones tienen la capacidad de recibir a través del usuario nuevos valores de los parámetros cinéticos, este los puede ingresar en la etiqueta Kinetics-parameters de la operación.

## **ANEXO F. COEFICIENTES DE RENDIMIENTO**

**Tabla 11.** Coeficientes de rendimiento

<b>Metabolismo</b>	<b>Carbo- hidrato<sub>is</sub></b>	<b>Carbo- hidrato<sub>in</sub></b>	<b>Carbo- hidrato</b>	<b>Lípido</b>	<b>LCFA</b>	<b>Prote<sub>is</sub></b>	<b>Prote<sub>in</sub></b>	<b>Amino- ácido</b>
Enzimático glucosa	-1	0.5	0.5					
Enzimático proteína						-1	0.2	0.8
Degradación glucosa			-12.86					
Degradación aminoácido								-14.493
Degradación GTO				-192.16	183.9			
Degradación oleato					-9.837			
Degradación propianato								
Degradación butirato								
Degradación valerato								
Degradación acetato								
<b>Metabolismo</b>	<b>NH4-N</b>	<b>Acetato</b>	<b>Propia.</b>	<b>Butirato</b>	<b>Valerato</b>	<b>Ch4</b>	<b>Co2</b>	<b>H2S</b>
Enzimático glucosa								
Enzimático proteína								
Degradación glucosa	-0.124	3.543	2.937	3.079			2.413	
Degradación aminoácido	2.061	9.282	1.178	1.045	0.705		1.723	0.018
Degradación GTO	-0.124		15.151				-0.278	
Degradación oleato	-0.124	18.208				1.905	-6.267	
Degradación propianato	-0.124	8.006	-10.57			1.509	1.01	
Degradación butirato	-0.124	15.366		-11.92		0.965	-3.303	
Degradación valerato	-0.124	7.247	10.029		-13.82	0.966	-3.305	
Degradación acetato	-0.124	-24.135				6.082	16.726	

Fuente: Angelidaki 1999.