

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

GENERACIÓN DE UNA HERRAMIENTA DE SIMULACIÓN DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA DE RESIDUOS SÓLIDOS ORGÁNICOS **MUNICIPALES A PARTIR DEL MODELO ADM1**

> T E S I S QUE PARA OBTENER EL TITULO DE **INGENIERA QUÍMICA** PRESENTA

MARIELA CASTILLO REYES

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX. 2017



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO

PRESIDENTE:	Víctor Manuel Luna Pabello
VOCAL:	Aida Gutiérrez Alejandre
SECRETARIO:	Alfonso Durán Moreno
SUPLENTE 1:	Martín Rivera Toledo
SUPLENTE 2:	Rodolfo Zanella Specia

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

Universidad Nacional Autónoma de México, Torre de Ingeniería, 3er Piso Ala Sur. Ciudad Universitaria, Coyoacán, México, D.F.

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Alfonso Durán Moreno

SUPERVISOR TÉCNICO:

Israel F. Islas Bernal

SUSTENTANTE:

Mariela Castillo Reyes

ÍNDICE

1. Intr	oducció	n1
1.1.	Probler	nática3
1.2.	Justifica	ación4
1.3.	Objetiv	o general6
1.4.	Objetiv	os específicos6
2. Fur	ndament	os teóricos7
2.1.	Residu	os Sólidos Urbanos7
2.1	.1. Imp	pactos de los residuos sobre la población y los ecosistemas9
2.2.	Fracció	n Orgánica de los Residuos Sólidos Urbanos (FORSU)11
2.2	.1. Tra	tamiento de la FORSU12
2.3.	Digesti	ón anaerobia14
2.3	.1. Pro	ocesos bioquímicos16
2	.3.1.1.	Hidrólisis17
2	.3.1.2.	Fermentación o Acidogénesis18
2	.3.1.3.	Acetogénesis19
2	.3.1.4.	Metanogénesis19
2.3	.2. Pro	ocesos fisicoquímicos21
2	.3.2.1.	Procesos líquido-líquido21
2	.3.2.2.	Procesos líquido-gas23
2.3	.3. Pa	rámetros que influyen en la digestión anaerobia
2	.3.3.1.	pH y Alcalinidad24
2	.3.3.2.	Hidrógeno25
2	.3.3.3.	Composición elemental de la FORSU25
2	.3.3.4.	Sólidos27
2	.3.3.5.	Nutrientes28
2	.3.3.6.	Temperatura28
2	.3.3.7.	Tiempo de retención
2	.3.3.8.	Inhibidores microbianos

2.4. Modelos matemáticos del proceso de digestión anaerobia	31			
2.4.1. Modelos generales				
2.4.2. El modelo ADM1	35			
3. Planteamiento de una solución del ADM1 para FORSU	41			
3.1. Descripción del método matricial	41			
3.2. Selección de un método numérico	43			
3.3. Modificaciones y adaptaciones realizadas al modelo	45			
4. Elaboración de la herramienta de simulación	48			
4.1. Implementación del modelo en Excel	49			
4.2. Descripción de la herramienta de simulación	50			
5. Validación de la herramienta de simulación	53			
6. Resultados y discusión	55			
6.1. Verificación del método numérico	55			
6.2. Simulación con datos de experimentación de laboratorio	57			
6.2.1. Condiciones iniciales experimentales para la simulación	58			
6.2.2. Comportamiento de las variables simuladas	61			
6.2.2.1. Fase líquida	61			
6.2.2.2. Fase gaseosa	67			
6.3. Validación de la herramienta de simulación	71			
6.3.1. Condiciones iniciales para la simulación	71			
6.3.2. Comparación del comportamiento de las variables simuladas	73			
7. Conclusiones	87			
8. Bibliografía				
ANEXOS	93			
Anexo I. Matrices de ecuaciones en el modelo ADM1, (Batstone, 2002)	94			
Anexo II. Ecuaciones utilizadas en el modelo ADM1	96			
Anexo III. Valores de las constantes utilizadas	107			
Anexo IV. Resultados de la experimentación en la UPIIA.	112			
Anexo V. Presentación de la herramienta de simulación	115			
Anexo VI. Datos utilizados para la validación121				
Anexo VII. Memoria de cálculo	124			

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Capacidad de biodegradación de los RSO (Tchobanoglous, 1996) 1	1
Tabla 2. Tratamiento biológico de la FORSU (Montes, 2008) 1	2
Tabla 3. Características generales del biogás. (Dublein y Steinhauser, 2008) 1	4
Tabla 4. Producción y composición teórica del biogás (Varnero, 2011) 2	26
Tabla 5. Clasificación de los sustratos para la DA (Varnero, 2011) 2	26
Tabla 6. Procesos omitidos del ADM1 (Batstone, 2002)	39
Tabla 7. Parámetros modificados para FORSU. 4	16
Tabla 8. Parámetros modificados con el artículo. 5	54
Tabla 9. Datos del reactor en la herramienta de simulación	58
Tabla 10. Condiciones iniciales en la herramienta de simulación	59
Tabla 11. Datos del reactor para la validación 7	1′
Tabla 12. Condiciones iniciales en la herramienta de simulación 7	72
Tabla 13. Comparación del error obtenido con las diferentes simulaciones8	36

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Generación de RSU por región, 2011. (SEMARNAT, 2012).	8
Figura 2. Composición de RSU en México, 2011. (SEMARNAT, 2012).	9
Figura 3. Procesos de conversión en la DA (Batstone, 2002).	16
Figura 4. Mecanismo de reacción (Batstone, 2002).	36
Figura 5. Implementación del modelo ADM1 en Excel (Cendales Ladino, 2011).	49
Figura 6. Solución analítica vs. solución numérica.	56
Figura 7. Acercamiento de solución analítica vs. solución numérica.	57
Figura 8. Concentración de material complejo.	61
Figura 9. Concentración de monosacáridos.	62
Figura 10. Concentración de degradadores de monosacáridos.	63
Figura 11. Concentración de nitrógeno inorgánico.	64
Figura 12. Concentración de carbono inorgánico.	65
Figura 13. Concentración de dióxido de carbono en fase líquida.	66
Figura 14. Variación de pH en el sistema.	67
Figura 15. Rapidez de transferencia de gas metano de la fase líquida a la fase	
gaseosa.	68
Figura 16. Metano generado en fase gaseosa (experimental vs estimado).	69
Figura 17. Composición estimada del biogás.	70
Figura 18. pH experimental 11%ST (Dong, 2010).	74
Figura 19. pH simulado 11%ST.	75
Figura 20. Concentración de AGVs experimental 11%ST (Dong, 2010).	76
Figura 21. Concentración de AGVs simulada (Dong, 2010).	76
Figura 22. Producción de gas acumulada 11%ST (Dong, 2010).	77
Figura 23. Producción de metano acumulada simulada 11%ST.	78
Figura 24. Composición del biogás generado (Dong, 2010) 11%ST.	78
Figura 25. Composición del biogás simulado 11%ST.	79
Figura 26. pH experimental 13.5%ST (Dong, 2010).	80
Figura 27. pH simulado 13.5%ST.	81

Figura 28. Concentración de AGVs 13.5%ST (Dong, 2010).	81
Figura 29. Concentración de AGVs simulada.	82
Figura 30. Producción de gas acumulada 13.5%ST (Dong, 2010).	83
Figura 31. Producción de metano acumulada simulada 13.5%ST.	83
Figura 32. Composición del biogás generado (Dong, 2010) 13.5%ST.	84
Figura 33. Composición del biogás simulado 13.5%ST.	85

LISTA DE ABREVIATURAS

AA	Aminoácidos			
Ac	Acetato			
	Anaerobic Digestion Model No.1 (Modelo de Digestión			
ADIVIT	Anaerobia No.1)			
AGV	Ácidos grasos volátiles			
ATP	Adenosín trifosfato			
Bu⁻	Butirato			
CH ₄	Metano			
CO	Carga orgánica			
CO ₂	Dióxido de carbono			
COD o DQO	Chemical oxygen demand (Demanda química de oxígeno)			
COV	Compuestos orgánicos volátiles			
DA	Digestión anaerobia			
DAE	Differential algebraic equation (Ecuación diferencial algebraica)			
DBO	Demanda Biológica de Oxígeno			
DE	Differential equation (Ecuación diferencial)			
FO	Fracción orgánica			
FORSU	Fracción orgánica de los residuos sólidos urbanos			
H ₂ CO ₃	Ácido carbónico			
H ₂ S	Ácido sulfhídrico / Sulfuro de hidrógeno			
HAc	Ácido acético			
HBu	Ácido butírico			
HCO ₃	Bicarbonato			
HPr	Ácido propiónico			
HVa	Ácido valérico			
INE	Instituto Nacional de Ecología			
11.47.4	International Water Association (Asociación Internacional del			
IVVA	Agua)			
LCFA	Long chain fatty acids (Ácidos grasos de cadena larga)			

LCFA ⁻	Equivalente base de LCFA		
	Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los		
LGPGIK	Residuos		
MO	Materia orgánica		
MS	Monosacáridos		
NH₃	Amoniaco		
NH4 ⁺	Amonio		
NPK	Acrónimo para Nitrógeno (N), Fósforo (P) y Potasio (K)		
OFMSW	Organic fraction of municipal solid waste (FORSU)		
рН	Potencial de hidrógeno		
pKa	Coeficientes de disociación		
Pr ⁻	Propionato		
PTAR	Planta de Tratamiento de Aguas Residuales		
RSM	Residuos sólidos municipales		
RSO	Residuos sólidos orgánicos		
RSOM	Residuos sólidos orgánicos municipales		
RSU	Residuos sólidos urbanos		
SAO	Sustancias agotadoras del ozono		
Sedesol	Secretaría de Desarrollo Social		
SEMARNAT	Secretaria del Medio Ambiente y Recursos Naturales		
SS	Sólidos suspendidos		
ST	Sólidos totales		
SV	Sólidos volátiles		
SVT	Sólidos volátiles totales		
TRH	Tiempo de retención hidráulica		
TRS	Tiempo de retención de sólidos		
UPIIA	Unidad de Proyectos y de Investigación en Ingeniería Ambiental		
UNAM	Universidad Nacional Autónoma de México		
Va	Valerato		
ZMVM	Zona Metropolitana del Valle de México		

RESUMEN

El presente trabajo se enfoca al estudio de los fundamentos bioquímicos y fisicoquímicos de la Digestión Anaerobia (DA) así como los modelos matemáticos que la describen, en específico el modelo Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1).

Se planteó una solución del modelo original ADM1 enfocada a la DA de la Fracción Orgánica de Residuos Sólidos Urbanos (FORSU) aplicable al tratamiento de residuos de la Zona Metropolitana del Valle de México (ZMVM), realizando las modificaciones y adecuaciones necesarias y generando así una herramienta de cálculo. Dicha herramienta se construyó en Microsoft Excel con el objetivo de ser fácilmente modificable para ajustarse a casos específicos además de estar desarrollada en un software muy conocido y de libre distribución.

Utilizando un sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas (DAE), se aplicaron los métodos de Adams-Bashforth y Runge-Kutta a las ecuaciones de velocidad y la estequiometria de las reacciones bioquímicas del modelo. El sistema de ecuaciones ácido-base se implementó como un conjunto de ecuaciones algebraicas implícitas, lo que permitió el uso del método de Newton-Raphson.

Considerando un caso de estudio experimental para el ajuste de los parámetros de dicha herramienta y realizando posteriormente simulaciones de experimentaciones a las condiciones reportadas en la literatura, fue posible validar la correcta descripción del proceso de DA a las diferentes concentraciones de FORSU. En ambos casos se compararon los resultados experimentales con los obtenidos en la herramienta desarrollada y se encontró que el error porcentual entre los resultados experimentales y las simulaciones aumenta proporcionalmente con la cantidad de sólidos totales en el reactor.

Factores como las limitaciones de transferencia de masa en la fase líquida y hacia la fase gaseosa adquieren mayor relevancia en sistemas con un alto contenido de sólidos como lo es el tratamiento de FORSU por lo que se requiere su descripción matemática y su incorporación al modelo para la correcta predicción del proceso.

ix

1. Introducción

Los residuos sólidos se dividen en inorgánicos y orgánicos; estos últimos son conocidos como la fracción orgánica de los residuos sólidos urbanos (FORSU) o como residuos sólidos orgánicos municipales (RSOM), y son aquellos que pueden ser tratados en el proceso de digestión anaerobia (DA).

Dentro del manejo integral de los residuos sólidos urbanos (RSU), el tratamiento biológico se destina a los residuos orgánicos, como son los residuos alimenticios y de jardín. El objetivo principal de los procesos de conversión biológica es la transformación de la materia orgánica de los residuos en un producto final estable.

El proceso más conveniente para tratar la FORSU es la digestión anaerobia, debido no sólo a que se disminuye el impacto negativo al medio ambiente, sino que además permite el aprovechamiento de energía renovable, la generación de composta a partir del residuo resultante y la recuperación de nutrientes para fertilizantes (Wellinger, 2005).

La DA es un proceso biológico que se lleva a cabo en ausencia de oxígeno y en el cual participan diferentes comunidades microbianas, donde la fracción biodegradable de la materia orgánica se convierte en una mezcla de gases constituida principalmente por dióxido de carbono (CO₂) y metano (CH₄), denominada "biogás", y por otra parte se genera un residuo al término del proceso denominado "digestato" (Tchobanoglous, Theisem y Vigil, 1993). Generalmente el proceso de DA realizado de forma controlada se lleva a cabo en un biodigestor cerrado a la atmósfera, con la finalidad de recuperar el biogás generado para su uso posterior.

El biogás es un gas combustible generado de la degradación anaerobia de la materia por lo que, a diferencia de los combustibles fósiles, es permanentemente renovable. Con la calidad adecuada puede utilizarse en prácticamente todas las aplicaciones que han sido desarrolladas para el gas natural, entre las cuales destacan las siguientes: combustión directa y utilización del calor, generación de

¹

electricidad o cogeneración, uso como combustible para vehículos y adición de éste a la red de gas natural (Forster, 2005).

El digestato es el subproducto del proceso de DA que, dependiendo de la tecnología utilizada, puede obtenerse líquido o sólido. En general presenta un alto contenido de nitrógeno en forma de amonio (NH₄⁺), el cual es valioso para el desarrollo de cultivos agropecuarios. Es por esto que el digestato resulta ser una fuente rica en nutrientes, por lo que se considera como acondicionador de suelos. Además, las fracciones orgánicas contenidas en el digestato proporcionan condiciones adecuadas para la actividad biológica de los suelos, afectando sus características físicas, químicas y biológicas, así como su estabilización (Varnero, 2011).

El proceso de DA se ve afectado por los cambios en las condiciones ambientales, propiedades fisicoquímicas y operacionales; éstas deben ser monitoreadas y mantenerse en el intervalo óptimo establecido. Entre los factores que se deben considerar para mantener dentro de los parámetros establecidos, se encuentran: pH, alcalinidad, temperatura, toxicidad, nutrientes, composición del sustrato, humedad, entre otros.

El Modelo de Digestión Anaerobia No.1 ("Anaerobic Digestion Model No.1"), también conocido como ADM1, es un modelo que describe las principales reacciones bioquímicas y fisicoquímicas que se llevan a cabo en el proceso de DA. Las ecuaciones bioquímicas son la base del modelo, considerándose un modelo del tipo estructurado que incluye los cuatro pasos principales del proceso anaerobio (hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis), además de pasos de desintegración extracelulares (Cendales Ladino, 2011).

La implementación del modelo depende de la especificación de los procesos fisicoquímicos, ya sea como un sistema de ecuaciones algebraicas que requieren la solución de una ecuación diferencial algebraica implícita o como una rapidez cinética, que genera un modelo más rígido con un mayor número de ecuaciones diferenciales.



El ADM1 es un modelo cinético de aplicación universal que permite la descripción matemática de la DA de diferentes tipos de sustratos orgánicos, la aplicación de este modelo para describir el comportamiento dinámico de un reactor anaerobio para el tratamiento de la FORSU permite la modelación de los procesos llevados a cabo, que a su vez contribuye a la generación de simuladores enfocados al entendimiento y optimización de dicho proceso.

1.1. Problemática

A partir del siglo XX, con el crecimiento de una economía basada, entre otros factores, en el avance tecnológico acelerado, el consumismo y la cultura de "usar y tirar", el problema de la generación de residuos comienza a tomar importancia significativa debido a su grave impacto sobre el medio ambiente. Desde entonces ha habido un creciente interés en el tratamiento de residuos sólidos urbanos, principalmente en Europa, donde ha tenido un gran éxito económico, social y, sobre todo, ambiental.

Actualmente, México enfrenta serios problemas en materia de gestión de los residuos sólidos urbanos (RSU) debido al crecimiento exponencial de la población y el consecuente incremento anual de consumo de productos y desecho de los mismos; es por esto que tanto las características como la generación de RSU han cambiado de manera considerable en las últimas décadas.

El manejo adecuado de los RSU tiene como objetivo final, además de proteger la salud de la población, evitar el impacto potencial que podrían ocasionar sobre los ecosistemas. Sin embargo, la situación del manejo de residuos dista mucho de ser la adecuada a lo largo del país. En 2010, en promedio se recolectaron diariamente alrededor de 86,357 toneladas de RSU que es tan sólo el 76.7% de los residuos totales generados en el país. En 2011 se estimó que 72% del volumen generado de RSU en el país se dispuso en rellenos sanitarios y sitios controlados, el 23% se depositó en sitios no controlados y solamente el 5% restante se recicló. Con estas

cifras resulta evidente la problemática que enfrenta el país con respecto a la gestión de los residuos y las consecuencias ambientales que conlleva (SEMARNAT, 2012).

El uso de la DA como sistema de tratamiento de aguas inició tardíamente en México comparado con los países europeos o aún más con los demás de Norteamérica. El primer digestor se construyó en 1987 siendo que la implementación de estos procesos se dio a partir de 1950. El desarrollo posterior fue lento debido a la crisis económica y la reducción de la disponibilidad de fondos públicos y privados para resolver problemáticas ambientales (Monroy, 1998).

Al cierre de 2011, el número de plantas de tratamiento de aguas en operación fue de 653, con una capacidad instalada de 134,531 L/s y un caudal tratado de 96,647 L/s (CONAGUA, 2011). Adicional a estas plantas de tratamiento, en la actualidad se están construyendo otras nuevas, como la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) Atotonilco y la PTAR Agua Prieta, que permitirán incrementar la capacidad instalada en 43,500 L/s. En cuanto a los residuos sólidos orgánicos (RSO), en un estudio piloto del Instituto Nacional de Ecología (INE) realizado en el año 2005 se identificaron 61 plantas de compostaje, que estaban operando o que hubieran operado en algún momento en la zona centro del país, por lo que resulta evidente que aún no se ha llevado a cabo la implementación del proceso de digestión anaerobia para el tratamiento de estos residuos.

1.2. Justificación

El interés principal con respecto a la DA es utilizar el biogás producido en las plantas instaladas alrededor del mundo como combustible para la generación de energía mecánica, eléctrica y térmica.

La FORSU ha resultado ser un sustrato adecuado para dicho proceso debido a su elevado contenido de sólidos volátiles totales (SVT), lo que confiere la oportunidad de reducir significativamente la cantidad de residuos urbanos biodegradables que se envían a un relleno sanitario para su disposición final, además de disminuir las



Para que sea posible la implementación del proceso de DA de FORSU en el país es necesario el entendimiento del proceso, el cual se lleva a cabo a través de herramientas de cálculo que permitan simular el comportamiento de los componentes del sustrato dentro del reactor anaerobio para que dicho proceso pueda ser diseñado, operado, controlado y optimizado.

Actualmente, las herramientas de cálculo y simulación del proceso de digestión anaerobia disponibles, están diseñadas principalmente para evaluar el tratamiento de lodos generados en el tratamiento de aguas residuales y han sido desarrolladas en software que no sólo requieren de la adquisición de una licencia del mismo, sino que también el usuario debe poseer cierto nivel de conocimiento del lenguaje de programación en el que se base dicho software por lo que no cualquier persona puede hacer uso de ellas.

El presente trabajo tiene como finalidad plantear una solución del modelo ADM1 enfocándolo al proceso de DA de la FORSU, realizando las modificaciones y adecuaciones necesarias generando así una herramienta de simulación. Dicha herramienta estará construida en Microsoft Excel con el objetivo de que sea fácilmente modificable para ajustarse a casos específicos, además de estar desarrollada en un software muy conocido y de uso y distribución extensa. Se considerarán casos de estudio para la validación de dicha herramienta de simulación, comparando los resultados obtenidos en estos casos con los obtenidos por la herramienta de simulación para asegurar su correcto funcionamiento, para que de esta manera los ajustes al modelo y la herramienta desarrollada sean aplicables a la evaluación del tratamiento de residuos sólidos orgánicos por DA.

1.3. Objetivo general

Proponer una solución del modelo ADM1 enfocándolo al proceso de DA de la FORSU generando así una herramienta de simulación que sea aplicable en estudios de tratamiento de la fracción orgánica de residuos sólidos urbanos.

1.4. Objetivos específicos

- Ajustar el modelo ADM1 implementando y adecuando los parámetros específicos para el tratamiento de la FORSU a través del proceso de DA utilizando los resultados experimentales obtenidos y proporcionados por la Unidad de Proyectos y de Investigación en Ingeniería Ambiental (UPIIA) de la Facultad de Química de la UNAM.
- Implementar el modelo ADM1 ajustado en Excel generando así una herramienta que permita la descripción del proceso de digestión anaerobia para llevar a cabo la evaluación del tratamiento de residuos orgánicos.
- Validar la herramienta de simulación generada por comparación con resultados de estudios reportados en la librería con el fin de corroborar la existencia de una correspondencia entre el sistema real y el modelo ajustado.

2. Fundamentos teóricos

2.1. Residuos Sólidos Urbanos

Los residuos sólidos urbanos (RSU) son definidos por la Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR) como aquellos generados en las casas habitación que resultan de la eliminación de los materiales que se utilizan en las actividades domésticas, de los productos que consumen y de sus envases, embalajes o empaques, así como los residuos que provienen de cualquier otra actividad dentro de establecimientos o en vía pública, que genere residuos con características domiciliarias y los resultantes de la limpieza de las vías y lugares públicos (LGPGIR, 2003).

En otras palabras, los así denominados en México RSU, o como se les conoce internacionalmente, los residuos sólidos municipales (RSM), son los residuos no peligrosos generados en viviendas, edificios de departamentos, establecimientos comerciales, de negocios e institucionales y servicios municipales (SEMARNAT, 2012).

Las cifras sobre generación de RSU a nivel nacional, calculadas por la Secretaría de Desarrollo Social (Sedesol) conforme a lo establecido en la norma NMX-AA-61-1985 sobre la Determinación de la Generación de Residuos Sólidos Orgánicos, indican que en 2011 se generaron alrededor de 41 millones de toneladas de residuos, lo que equivale a cerca de 112.5 mil toneladas diarias de RSU. Esto representa un incremento de un 25% en un lapso de 8 años, es decir de 2003 a 2011 (SEMARNAT, 2012).

Como se puede apreciar en la Figura 1, la contribución del Distrito Federal (DF) a estas cifras es del 12% lo que representa 4.89 millones de toneladas anuales o el equivalente de 13.5 mil toneladas diarias de RSU de la cifra total; esto representa un incremento en la generación de residuos de dicha entidad del 19% en el mismo lapso de tiempo (2003-2011).



Dirección General de Equipamiento e Infraestructura en Zonas Urbano-Marginadas, Sedesol. México. 2012.

Figura 1. Generación de RSU por región, 2011. (SEMARNAT, 2012).

La generación *per cápita* nacional en 2011 fue de 370 kg/hab/año de los cuales la entidad federativa que registró mayor generación diaria de residuos fue el DF con 1.5 kg/hab/día (SEMARNAT, 2012).

En general, la composición de los RSU depende, entre otros factores, de los patrones de consumo de la población. En el país, el porcentaje de residuos orgánicos generados se redujo de una oscilación entre 65-70% en la década de los 50 a un 52.4% para 2011, lo que representa 21.48 millones de toneladas anuales a nivel nacional del total de RSU generados (SEMARNAT, 2012).

En la Figura 2 se observa la composición de los residuos sólidos generados en el país durante el año 2011.



Figura 2. Composición de RSU en México, 2011. (SEMARNAT, 2012).

2.1.1. Impactos de los residuos sobre la población y los ecosistemas

Las consecuencias ambientales de la inadecuada disposición de los residuos pueden ser negativas para la salud de las personas y de los ecosistemas naturales. A continuación se describen brevemente algunos de los impactos que estas acciones tienen:

o Generación de contaminantes y gases de efecto invernadero

La descomposición de los residuos orgánicos produce gases que resultan desagradables no sólo por los olores que generan, sino que pueden ser peligrosos debido a su toxicidad y su explosividad. Algunos de ellos son también gases de efecto invernadero que contribuyen al cambio climático global. Entre estos gases destacan el dióxido de carbono (CO₂), monóxido de carbono (CO), metano (CH₄), ácido sulfhídrico (H₂S) y compuestos orgánicos volátiles (COVs, como acetona, benceno, estireno, tolueno y tricloro etileno) (SEMARNAT, 2012).

• Adelgazamiento de la capa de ozono

Las sustancias agotadoras del ozono (SAO) que se emplean en la fabricación de envases de unicel, como propulsores de aerosoles para el cabello, en algunas pinturas y desodorantes, plaguicidas, así como en refrigeradores y climas artificiales contribuyen, al ser liberadas a la atmósfera, al adelgazamiento de la capa de ozono. Cuando los envases de estos productos son desechados de manera inadecuada se convierten en fuentes de emisión de SAO (SEMARNAT, 2012).

• Contaminación de los suelos y cuerpos de agua

La descomposición de los residuos y su contacto con el agua puede generar lixiviados (es decir, líquidos que se forman por la reacción, arrastre o filtrado de los materiales) que contienen, en forma disuelta o en suspensión, sustancias que se infiltran en los suelos o escurren fuera de los sitios de depósito. Los lixiviados pueden contaminar los suelos y los cuerpos de agua, provocando su deterioro y representando un riesgo para la salud humana y de los demás organismos (SEMARNAT, 2012).

• Proliferación de fauna nociva y transmisión de enfermedades

Los residuos orgánicos que se disponen atraen a un numeroso grupo de especies de insectos, aves y mamíferos que pueden transformarse en vectores de enfermedades peligrosas como la peste bubónica, tifus murino, salmonelosis, cólera, leishmaniasis, amebiasis, disentería, toxoplasmosis, dengue y fiebre amarilla, entre otras (SEMARNAT, 2012).



2.2. Fracción Orgánica de los Residuos Sólidos Urbanos (FORSU)

La FORSU es la fracción de residuos orgánicos húmedos y composteables de rápida degradación encontrada en los RSU; en pocas palabras, es todo aquel residuo sólido biodegradable. Su composición varía significativamente con base en la región donde se generan los residuos, pero en general está compuesta de carbohidratos, proteínas y lípidos (Deublein y Steinhauser, 2008).

Los RSO pueden clasificarse de acuerdo a su biodegradabilidad, es decir, pueden ser rápidamente biodegradables o lentamente biodegradables dependiendo de la velocidad con la que se reducen a CO₂ y agua a través de la actividad de los microorganismos. En la Tabla 1 se muestran algunos componentes de los residuos orgánicos y su biodegradabilidad (Tchobanoglous, Theisen y Vigil, 1996).

Componente de residuo	Rápidamente	Lentamente
orgánico	biodegradable	biodegradable
Residuos de comida	•	
Periódicos	•	
Papel de oficina	•	
Cartón	•	
Textiles		•
Goma		•
Cuero		•
Residuos de jardín	•	
Madera		•
Orgánicos misceláneos		•

Tabla	1. Ca	pacidad	de biodec	aradación	de los	RSO	(Tchobanoglous.	1996).
rusiu	Ou	puolaua	ao modog	jiaaaoioii	40,000	1.00	(Tonobanogioao,	1000).

Para llevar a cabo el proceso de DA se recomienda considerar únicamente residuos orgánicos rápidamente biodegradables.

Dentro del manejo integral de los RSU, el tratamiento biológico se destina a los residuos orgánicos. El objetivo principal de los procesos de conversión biológica es la transformación de la materia orgánica de los residuos en un producto final estable, el cual puede reciclarse, dependiendo de sus características específicas, como fertilizante y estabilizador de suelo, o bien, en la producción de biogás para la generación de energía eléctrica (Rivera, 2005).

En la Tabla 2 se describen brevemente los principales procesos biológicos para el tratamiento de la FORSU.

Proceso	Medio	Descripción	Productos
Compostaje	Conversión biológica en presencia de oxígeno	Degradación de la MO mediante una población microbiana en un medio aerobio. El tiempo necesario para que se lleve a cabo dependerá de la naturaleza del residuo, contenido de humedad, nutrientes disponibles y otros factores ambientales como la temperatura.	Composta (material húmico utilizado como acondicionador de suelos). CO ₂ (principalmente) CH ₄ (menor a 1%) H ₂ O
Digestión anaerobia	Conversión biológica en ausencia de oxígeno	Fermentación de la MO en ausencia de oxígeno en el que resulta importante mantener estabilidad en los parámetros por los que se ve afectado el proceso, tales como temperatura, humedad y pH.	CH ₄ CO ₂ NH ₃ H ₂ S Digestato (materia orgánica resistente)

Tabla 2. Tratamiento biológico de la FORSU (Montes, 2008).



Como se observa en la Tabla 2, al someter los residuos orgánicos a una degradación aerobia, se generan compuestos de bajo poder energético como CO₂ y H₂O. Gran parte de la energía se pierde y se libera a la atmósfera. Se estima que la pérdida de energía de un proceso aerobio es aproximadamente veinte veces superior a la de un proceso anaerobio (Varnero, 2011).

En el caso de la degradación anaerobia, se generan productos del metabolismo con alto poder energético, los cuales sirven como nutrientes de otros organismos o bien son utilizados con fines energéticos por la sociedad (Tchobanoglous, Theisem y Vigil, 1993).

En general, entre las ventajas de ambos tratamientos biológicos de los residuos orgánicos, figuran las siguientes:

- Recuperación de materia orgánica (MO) y nutrientes para añadirlos en los suelos.
- Reducción de problemas generados por la MO en los vertederos.
- Reducción del número de instalaciones finales para el tratamiento de residuos (depósitos controlados, incineradoras, entre otros).
- Adaptación a los requerimientos de las normativas comunitarias y acuerdos internacionales de protección al medio ambiente.
- Reducción del volumen de los residuos.
- Estabilización de los residuos.
- Eliminación de agentes patógenos en el material de desecho.
- En el caso de la DA, obtención de energía.

2.3. Digestión anaerobia

La DA es un proceso biológico complejo y degradativo que se lleva a cabo en ausencia de oxígeno y en el cual participan diferentes comunidades microbianas en la conversión de la fracción biodegradable de la materia orgánica en una mezcla de gases denominada "biogás", constituida principalmente por CO₂ y CH₄ además de generar un residuo al término del proceso denominado "digestato" (Tchobanoglous, Theisen y Vigil, 1993).

La composición del biogás dependerá en gran medida del tipo de tecnología y del material biodegradable utilizado para la DA (Forster, 2005), sin embargo, se puede generalizar la composición y características típicas de éste, las cuales se describen en la Tabla 3.

Propiedad	Cantidad
	55 – 70% metano (CH ₄)
Composición	30 – 45% dióxido de carbono (CO ₂)
	Trazas de otros gases
Contenido energético	6.0 – 6.5 kWh/m ³
Equivalente de combustible	0.60 – 0.65 L petróleo crudo/m ³ biogás
Límite de explosión	6 – 12% de biogás en el aire
Temperatura de ignición	650 – 750 °C
Presión crítica	74 – 88 atm
Temperatura crítica	-82.5 °C
Densidad normal	1.2 kg/m ³

Tabla 3	Características	generales de	l hiogás	(Dublein	v Steinhauser	2008)
rabia 5.	Caracteristicas	yenerales de	n biogas.	Dubien	y oten in auser,	2000).

Como se observa en la Tabla 3, el biogás presenta un alto contenido de metano, por lo que posee un elevado poder calorífico. Su densidad energética de 6 kWh/m³ equivale aproximadamente a 0.65 L de gasóleo (Kossmann y Pönitz, 1997).



El principal subproducto generado a partir del proceso de DA es el digestato, el cual consta de MO estabilizada y tiene un valor potencial como fertilizante. Esto se debe a que los nutrientes NPK (Nitrógeno, Fósforo y Potasio) han sido transformados a formas minerales directamente asimilables por las plantas (Bustamante et.al., 2013). Una de las características del digestato, es que presenta menor concentración de sólidos volátiles en comparación con la FORSU pues éstos ya han sido digeridos y al ser los responsables del olor, el digestato no presenta un olor tan penetrante (Forster, 2005).

El biodigestor o fermentador es el equipo principal donde ocurre el proceso bioquímico de degradación de la materia orgánica a nivel industrial. Generalmente el proceso de DA se lleva a cabo en un biodigestor cerrado a la atmósfera con la finalidad de recuperar el biogás generado para su posterior uso. Estos equipos pueden incluir diversos sistemas integrados, tales como agitación, calentamiento y aislamiento térmico (Deublein y Steinhauser, 2008).

Utilizando el proceso de DA es posible convertir una gran cantidad de residuos en subproductos útiles. En la DA más del 90% de la energía disponible por oxidación directa se transforma en metano, consumiéndose sólo el 10% de la energía en el crecimiento microbiano (Varnero, 2011).

Los procesos de conversión que intervienen en la DA pueden ser divididos en dos tipos principales: procesos bioquímicos y procesos fisicoquímicos. La Figura 3 muestra los procesos de conversión llevados a cabo en la DA.



Abreviaciones mostradas: AA (aminoácidos), MS (monosacáridos), AGCL (ácidos grasos de cadena larga), HVa (ácido valérico), HBu (ácido butírico), HPr (ácido propiónico).



2.3.1. Procesos bioquímicos

La DA es consecuencia de una serie de interacciones metabólicas entre diferentes grupos de microorganismos y es descrita como un proceso de etapas múltiples de reacciones en serie y en paralelo (Pavlostathis, 1991).

Estos procesos son normalmente catalizados por enzimas intra- o extracelulares que actúan en una fase acuosa de material orgánico disponible. La desintegración de materiales complejos (incluyendo la biomasa muerta) a constituyentes particulados y su subsecuente hidrólisis enzimática a monómeros solubles son procesos extracelulares. La digestión de material soluble mediada por organismos es un proceso intracelular y éste resulta en el crecimiento y descomposición de biomasa (Batstone, 2002).



$$C_6 H_{12} O_6 \quad \rightarrow \quad 3CO_2 + 3CH_4 \tag{1}$$

$$C_{12}H_{24}O_6 + 3H_2O \rightarrow 4.5CO_2 + 7.5CH_4 \tag{2}$$

$$C_{13}H_{25}O_7N_3S + 6H_2O \rightarrow 6.5CO_2 + 6.5CH_4 + 3NH_3 + H_2S$$
 (3)

 Descomposición de carbohidratos; (2) Descomposición de grasas; (3) Descomposición de proteínas (Deublein y Steinhauser, 2008).

La DA es un proceso muy complejo tanto por el número de reacciones bioquímicas que tienen lugar como por la cantidad de microorganismos involucrados en ellas. De hecho, muchas de estas reacciones ocurren de forma simultánea.

El proceso de transformación de la materia orgánica a través de la DA se lleva a cabo en cuatro principales etapas: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis, durante las cuales ocurre la transformación de la materia biodegradable a biogás. Estas etapas se describen brevemente a continuación.

2.3.1.1. Hidrólisis

Es la primera etapa para la degradación de moléculas orgánicas muy grandes que son absorbidas y utilizadas como sustrato por los microorganismos.

En esta fase las moléculas orgánicas complejas y no disueltas (carbohidratos, grasas y proteínas) se rompen en compuestos más simples (aminoácidos, azúcares, ácidos grasos y algunos alcoholes, entre otros), mediante la acción de enzimas extracelulares secretadas por algunos microorganismos como las celulasas, amilasas, prolasas y lipasas (Schnüer y Jarvis, 2010).

Los compuestos solubles (diferentes tipos de oligosacáridos y azúcares, alcoholes, aminoácidos y ácidos grasos) son transportados a través de la pared celular y

constituyen las principales fuentes de carbono y energía para los microorganismos (Schnürer y Jarvis, 2010).

La etapa hidrolítica puede ser el proceso limitante de la velocidad global del proceso, sobre todo cuando se tratan residuos con alto contenido de sólidos. Además, la hidrólisis depende de la temperatura del proceso, del tiempo de retención hidráulico, de la composición bioquímica del sustrato (porcentaje de lignina, carbohidratos, proteínas y grasas), del tamaño de partículas, del nivel de pH, de la concentración de amonio y de la concentración de los productos de la hidrólisis (Khalid et.al., 2011).

2.3.1.2. Fermentación o Acidogénesis

En esta etapa se metabolizan los productos de la hidrólisis en el interior de la célula y se obtienen compuestos de peso molecular intermedio, tales como los ácidos orgánicos (acetato, propionato, butirato, lactato, entre otros) y alcoholes, además de otros subproductos importantes para etapas posteriores (amoniaco, hidrógeno, dióxido de carbono, entre otros) (Batstone y Jensen, 2011).

Los productos de la degradación de este proceso son el hidrógeno y el acetato, así como algunos otros compuestos, como los ácidos volátiles (propionato y butirato), los cuales pueden ser también degradados a acetato e hidrógeno, siendo estos últimos los principales precursores del metano generado por las arqueas metanogénicas (Batstone y Jensen, 2011).

Estas reacciones son reguladas por las condiciones del medio, incluyendo el pH, la concentración de hidrógeno en fase gaseosa, la temperatura y el tiempo de retención celular. Uno de los parámetros relevantes para el proceso son los ácidos grasos volátiles (AGV), dado que tienden a disminuir el pH y a interferir con el desarrollo de la reacción, provocando la inhibición de la actividad metanogénica (Neves, Oliveira y Alves, 2009).

2.3.1.3. Acetogénesis

En esta etapa, los productos finales de la etapa acidogénica se transforman en acetato, así la actividad principal de los microorganismos presentes proporciona donadores de hidrógeno, dióxido de carbono y acetato a las arqueas metanogénicas. Estos microorganismos son capaces de convertir los productos finales de la microbiota acidogénica en acetato a partir de la deshidrogenación acetogénica o la hidrogenación acetogénica (Fernández, 2010).

La deshidrogenación acetogénica se lleva a cabo como producto de la fermentación de AGVs o lactato y alcoholes mientras que las reacciones de hidrogenación acetogénica son llevadas a cabo por bacterias que pueden crecer autotróficamente con CO₂ y H₂ para producir acetato (Fernández, 2010).

La etapa de acetogénesis limita la rapidez de degradación en la etapa final. A partir de la cantidad y composición de biogás, se pueden obtener conclusiones sobre la actividad de las bacterias acetogénicas.

A esta altura del proceso, la mayoría de las bacterias anaerobias han extraído todo el alimento de la biomasa y, como resultado del metabolismo de éstas, eliminan los productos de desecho de sus células que serán los que se utilicen como sustrato de las bacterias metanogénicas en la etapa siguiente.

2.3.1.4. Metanogénesis

Es el último paso del proceso de descomposición anaerobia de la materia orgánica. La degradación metanogénica de cada sustrato depende tanto de la naturaleza del mismo como de la ruta metabólica seleccionada por los microorganismos para su degradación (Poggio, 2007). Los microorganismos metanogénicos pueden ser considerados los más importantes ya que son los responsables de la formación de metano y de la eliminación del medio de los productos de los grupos anteriores.

Se pueden establecer dos grandes grupos de microorganismos en función del sustrato principal que metabolizan: hidrogenotróficos, que consumen H₂ y CO₂ y acetoclásticos, que consumen acetato, metanol y algunas aminas (Batstone, 2002).

Existen por lo menos diez sustratos que se convierten en metano por la acción de las arqueas metanogénicas, los cuales liberan la energía adecuada para la síntesis de ATP (Carrillo, 2004). Las reacciones mediante las cuales se forma el metano en esta etapa se presentan a continuación.

$$CO_2 + 4H_2 \rightarrow CH_4 + 2H_2O \tag{4}$$

$$HCOO^{-} + H^{+} + 3H_{2} \rightarrow CH_{4} + 2H_{2}O$$
 (5)

$$CH_3COO^- + H^+ \rightarrow CH_4 + CO_2 \tag{6}$$

$$4CH_3OH \rightarrow 3CH_4 + CO_2 + 2H_2O \tag{7}$$

$$4CH_3HN_3Cl + 2H_2O \rightarrow 3CH_4 + CO_2 + 4NH_4Cl \tag{8}$$

$$CH_3OH + H_2 \rightarrow CH_4 + H_2O \tag{9}$$

(4) y (5) Formación de metano a partir de la reducción de CO2; (6) Formación de metano a partir de acetato;

(7) y (8) Formación de metano a partir de sustratos con un grupo metilo;

Se ha demostrado que la mayor parte del metano producido en los reactores anaerobios se forma a partir de la descarboxilación del acetato, a pesar de que, mientras todos los organismos metanogénicos son capaces de utilizar H₂ como aceptor de electrones, sólo dos géneros pueden utilizar acetato (Varnero, 2011).

Alrededor de 30% de la producción total de metano se atribuye a la reducción del CO₂ a partir de H₂, y sólo 5-6% de la formación total se atribuye al hidrógeno disuelto. Esto se debe a la "transferencia de hidrógeno entre especies", por medio de la cual el hidrógeno se traslada directamente de los microorganismos acetogénicos hacia los metanogénicos sin estar disuelto en el sustrato (Poggio, 2007).

⁽⁹⁾ Formación de metano a partir de reducción con hidrógeno.

2.3.2. Procesos fisicoquímicos

Adicionalmente a los procesos de tipo biológico debidos al crecimiento de microorganismos y al consumo de sustratos específicos, existe una serie de reacciones de tipo fisicoquímico que complementan al proceso de DA y que son requeridas para la modelación adecuada de este tipo de sistemas.

El sistema fisicoquímico puede ser definido como los procesos que ocurren comúnmente en los reactores anaerobios y que no son mediados biológicamente.

Estos procesos abarcan la asociación/disociación de iones, la transferencia líquidogas y la precipitación y solubilización de sólidos. Sin embargo, solamente los primeros dos tipos de procesos se han abordado en los modelos anaerobios debido a la dificultad de la implementación de los procesos líquido-sólido y el rango de precipitación de diferentes cationes (Batstone, 2002).

Los procesos fisicoquímicos resultan muy importantes debido a la cantidad de factores de inhibición biológica que pueden ser expresados con éstos, como lo son el pH, ácidos y bases libres y las concentraciones de gases solubles en la fase líquida (Cendales Ladino, 2011). Además, las principales variables de rendimiento, tales como el flujo de gas y la alcalinidad son dependientes de la correcta estimación de los procesos fisicoquímicos.

2.3.2.1. Procesos líquido-líquido

Dentro de estos procesos se considera la asociación y disociación de iones con iones de hidrógeno e hidróxido, ya que existe una gran cantidad de componentes importantes que tienen valores de coeficientes de disociación (pK_a) cercanos al pH de operación de los sistemas anaerobios y que afectan directamente en éste.



Como ya se ha mencionado, el pH es un factor importante que afecta el desarrollo óptimo del proceso de DA, en el cual la producción y consumo de productos de la digestión generan procedimientos específicos de amortiguamiento del pH que evitan que éste varíe drásticamente (Schnüer y Jarvis, 2010). Los principales compuestos que forman parte de este proceso ácido-base y de amortiguamiento son los AGV y algunos ácidos débiles, el sistema de carbonatos (CO₂, H₂CO₃, HCO₃⁻) y el amoniaco (NH₃, NH₄⁺).

En el caso de los ácidos débiles y AGV, se produce una disociación iónica del compuesto, liberando iones H⁺ en el medio. La siguiente ecuación ejemplifica este tipo de disociación para el ácido acético, que es separado en una reacción reversible generando un ion acetato y un ion H⁺ en el medio acuoso.

$$CH_3COOH \quad \leftrightarrow \quad CH_3COO^- + H^+ \tag{10}$$

El comportamiento del amoniaco en agua puede ser descrito en dos formas. El amoniaco, al disolverse en agua, tomará un protón y formará el ion amonio (NH₄+), dejando libre un ion hidroxilo (OH⁻). Por otra parte, el ion amonio se comporta como un ácido débil, liberando un protón y formando nuevamente amoniaco (Gerardi, 2003).

$$NH_3 + H_2 0 \quad \leftrightarrow \quad NH_4^+ + 0H^- \tag{11}$$

$$NH_4^+ \rightarrow NH_3 + H^+$$
 (12)

(11) Formación del ion amonio; (12) Formación de amoniaco

El dióxido de carbono se disuelve y reacciona con el agua para formar ácido carbónico (H₂CO₃), el cual se ioniza para formar ion bicarbonato liberando un protón. Adicionalmente, el ion bicarbonato liberado puede efectuar una segunda ionización reversible liberando un segundo protón y formando el ion carbonato; no obstante, en el intervalo de pH donde se lleva a cabo el proceso de DA, la concentración de carbonato es prácticamente despreciable (Gerardi, 2003).

$$CO_{2(ac)} + H_2O \quad \leftrightarrow \quad H_2CO_3 \tag{13}$$

$$H_2CO_3 + H_2O \quad \leftrightarrow \quad HCO_3^- + H^+ \tag{14}$$

$$H_2 CO_3 \quad \leftrightarrow \quad CO_3^{2+} + H^+ \tag{15}$$

(1) Formación de ácido carbónico; (2) Formación de ion bicarbonato;(3) Disociación del ion bicarbonato

El equilibrio es muy importante en los proceso de DA, debido a que hasta un 50% del biogás puede llegar a ser dióxido de carbono, además de que es mediante el control de alcalinidad como suele controlarse la acumulación de ácidos y por consiguiente, del pH.

2.3.2.2. Procesos líquido-gas

Como se mencionó anteriormente, durante la transformación de la materia orgánica se llevan a cabo reacciones que producen gases en la fase líquida. Los gases producidos en el proceso de DA son principalmente el metano, el dióxido de carbono y el hidrógeno. Estos tres gases son considerados significativos como productos intermedios ya que tienen un efecto importante en los procesos biológicos llevados a cabo (Batstone, 2002), sobretodo el metano y el CO₂ ya que además participan como sustratos en varias reacciones en el seno del líquido.

La continua producción de estos gases provoca que ocurra una desorción de los mismos hacia la fase gaseosa formando entonces el biogás y produciéndose, además una transferencia de cada uno de los gases hacia la fase líquida.

Las fases líquida y gaseosa en contacto alcanzarán el estado estacionario con respecto a la otra. Cuando la fase líquida está relativamente diluida, se puede utilizar la ley de Henry para describir la relación de equilibrio (Varnero, 2011).



2.3.3. Parámetros que influyen en la digestión anaerobia

A continuación se mencionan algunos de los parámetros fisicoquímicos y bioquímicos más relevantes que influyen en el proceso de digestión anaerobia y que son considerados para el modelado del proceso.

2.3.3.1. pH y Alcalinidad

El contenido de ácidos orgánicos, el pH y la alcalinidad son parámetros relacionados que influyen en el proceso microbiológico de la DA. Generalmente, los microorganismos no pueden tolerar valores extremos de pH, pues en condiciones muy alcalinas o ácidas algunos componentes microbianos se hidrolizan o algunas enzimas se desnaturalizan (Gerardi, 2003).

El pH del medio influye en la disociación y solubilidad de muchas moléculas que actúan sobre los microorganismos. Éste también determina la solubilidad del CO₂, afectando la rapidez de la fermentación, así como la disponibilidad de algunos nutrientes, como el amonio y el fosfato, que limitan el crecimiento microbiano en la mayoría de los ecosistemas.

Como se ha mencionado anteriormente, existe una gran variedad de microorganismos involucrados en el proceso, cuyos valores óptimos requeridos para su desarrollo pueden variar ampliamente. Para que el proceso se desarrolle satisfactoriamente en un biodigestor el pH del sistema no debe ser menor a 6.0 ni superior a 8.0 (Varnero, 2011).

El pH se utiliza como un parámetro para evaluar la correcta operación del sistema ya que su valor en el biodigestor no sólo determina la producción de biogás, sino también su composición. Una de las consecuencias de que se produzca un descenso del pH a valores inferiores de 6.0 es que el biogás generado sea muy pobre en metano y, por tanto, con menores cualidades energéticas (Varnero, 2011).



Por otra parte, el pH afecta a los diferentes equilibrios químicos existentes en el medio, pudiendo desplazarlos hacia la formación de un determinado componente que tenga influencia en el proceso. Este es el caso de los equilibrios ácido-base del amoniaco y del ácido acético. Al aumentar el pH se favorece la formación de amoniaco que, en elevadas concentraciones, inhibe el crecimiento microbiano y a valores de pH bajos se genera mayoritariamente la forma no ionizada del ácido acético que inhibe el mecanismo de degradación del propionato (Varnero, 2011).

2.3.3.2. Hidrógeno

La acidogénesis es la etapa del proceso que se ve afectada por la presión parcial de H₂; si ésta aumenta, la cantidad de compuestos orgánicos reducidos químicamente que se forman, disminuye. Las bacterias de esta etapa producen H₂ y están en constante simbiosis con los organismos que forman metano (Dublein y Steinhauser, 2008).

Cuando se garantiza una presión parcial baja de H₂, las reacciones en la acetogénesis se vuelven termodinámicamente posibles (Ostrem, 2004) pero una presión parcial de hidrógeno demasiado baja detendría la producción de metano.

2.3.3.3. Composición elemental de la FORSU

Tanto la rapidez de reacción como la calidad y cantidad del biogás dependerán del tipo de sustrato que se use para la DA. Cada tipo de residuo tiene distintas características y composición, esto se traduce en diferentes rendimientos y calidad del biogás. En la Tabla 4 se presentan los rendimientos teóricos de los componentes orgánicos básicos.
Compuesto	Fórmula	Biogás (m³/kg _{sv})	CH₄ (m³/kg _{s⊤})
Carbohidratos	$C_6 H_{12} O_6$	0.75	0.37
Lípidos	$C_{16}H_{32}O_2$	1.44	1.44
Proteínas	$C_{16}H_{24}O_5N_4$	0.98	0.49

Tabla 4. Producción y composición teórica del biogás (Varnero, 2011).

Dependiendo de la composición bioquímica de cada materia prima, se tendrá una dinámica de producción de biogás diferente. En términos generales, se pueden clasificar los sustratos en cuatro clases en función de su apariencia física, nivel de dilución, grado de concentración y características cuantitativas, como el porcentaje de sólidos totales (ST), sólidos volátiles (SV) y demanda química de oxígeno (DQO), como puede apreciarse en la Tabla 5.

Características	Clase	Tipo de sustrato	Características cuantitativas
Sólido	1	Basura doméstica Estiércol sólido	>20% ST 40-70% FO
Lodo altamente contaminado, alta viscosidad	2	Heces animales	100-150 g/L DQO 5-10% ST 4-8% SV
Fluidos con alto contenido de sólidos suspendidos (SS)	3	Heces animales de cría diluidas con agua de lavado Aguas residuales de mataderos	3-17 g/L DQO 1-2 g/L SS
Fluidos muy contaminados, sólidos en suspensión	4	Aguas residuales de agroindustrias Aguas negras	5-18 g/L DQO 4-500 g/L DQO

Tabla 5	Clasificación	de los	sustratos	para la	DA	(Varnero,	2011).
---------	---------------	--------	-----------	---------	----	-----------	--------



Los sustratos de Clase 1 pueden degradarse eficientemente en digestores tipo Batch o por lotes. Los sustratos de Clase 2 son degradados de manera eficiente en digestores de mezcla completa de operación continua. Por presentar una dilución mayor y en consecuencia una DQO menor, los sustratos de Clase 3 deben tratarse con digestores de alta eficiencia como los de filtro anaerobio. En cuanto a los sustratos Clase 4, debido a su alto contenido de DQO deben ser degradados en digestores aerobios intensivos para mayor eficiencia (Varnero, 2011).

2.3.3.4. Sólidos

La materia orgánica está compuesta en su mayor parte de agua y una fracción sólida que, para efectos de los tratamientos bioquímicos, frecuentemente se denomina fracción de sólidos totales (ST). Este porcentaje contenido en el sustrato que se alimenta en un biodigestor es un factor importante que debe considerarse para asegurar que el proceso se efectúe satisfactoriamente, debido a que la movilidad de los microorganismos metanogénicos se ve limitada a medida que aumenta el contenido de sólidos, lo que afecta la eficiencia y producción de biogás (Mata-Alvarez, 2003).

La DA se puede dividir en dos categorías de acuerdo con el contenido de sólidos en el sustrato: "seca" cuando el contenido de ST es de 25-30% y "húmeda" cuando el contenido se ST es menor de 15% (Ostrem, 2004).

Los sólidos volátiles (SV) son aquella porción de sólidos totales que se libera de una muestra, volatilizándose cuando se calienta durante dos horas a 600°C. Los SV contienen componentes orgánicos, los que teóricamente deben ser convertidos a metano durante la DA (Mata-Alvarez, 2003).

2.3.3.5. Nutrientes

Prácticamente toda la materia orgánica es capaz de producir biogás al ser sometida a DA. La calidad y cantidad del biogás producido dependerán de la composición y la naturaleza del residuo utilizado.

Los nutrientes que requieren los microorganismos involucrados en procesos aerobios y en procesos anaerobios pueden clasificarse en macronutrientes y micronutrientes. La cantidad y relación de estos nutrientes es necesaria para satisfacer la actividad bacteriana y para mantener un rendimiento aceptable en el biodigestor.

Los macronutrientes son nutrientes requeridos en grandes cantidades por todos los microorganismos, como lo son el nitrógeno amoniacal (NH₃/NH₄⁺) y el fosfato comúnmente presente en los sistemas como ortofosfato (PO₄-³). En contraste, los micronutrientes son aquellos requeridos por organismos específicos como lo son cobalto, hierro, níquel y azufre, los cuales usualmente se presentan en cantidades suficientes en la FORSU (Gerardi, 2003).

El carbono y nitrógeno son las principales fuentes de alimentación de las bacterias metanogénicas. El carbono constituye la fuente de energía y el nitrógeno es utilizado para la formación de nuevas células. Estas bacterias consumen 30 veces más carbono que nitrógeno, por lo que la relación óptima de estos dos elementos en la materia prima se considera en un rango de 30:1 hasta 20:1 (Varnero, 2011).

2.3.3.6. Temperatura

La temperatura es un factor muy importante a considerar durante el proceso de DA debido a que cada microorganismo posee un intervalo óptimo en el cual se muestran las tasas más elevadas de crecimiento y reproducción. Los valores mínimos y máximos de temperatura que un microorganismo puede tolerar determinan su supervivencia y el papel que desempeñará en cierto ecosistema. El efecto global



sobre el sistema debido a cambios en los parámetros fisicoquímicos con la temperatura es generalmente más importante que la debida a los cambios en los parámetros bioquímicos (Varnero, 2011).

La temperatura de operación del digestor es considerada uno de los principales parámetros de diseño, debido a la gran influencia de este factor en la velocidad de los procesos bioquímicos de la DA. Ésta actúa también sobre los aspectos fisicoquímicos del proceso. La solubilidad de los gases generados desciende al aumentar la temperatura y por otra parte, la solubilidad de la mayoría de las sales aumenta con el aumento de la temperatura. Además, la temperatura influye directamente en determinados equilibrios químicos, como los del amonio-amoniaco libre o de la ionización de los AGVs. Las variaciones bruscas de temperatura en el digestor pueden iniciar la desestabilización del proceso.

Existen tres rangos de temperatura en los que pueden trabajar los microorganismos anaerobios: psicrofílico (por debajo de 25°C), mesofílico (entre 25 y 45°C) y termofílico (entre 45 y 65°C), siendo la velocidad de crecimiento de los microorganismos mayor conforme se aumenta el rango de temperatura (Atlas y Bartha, 2002).

Hasta el momento, el rango psicrofílico ha sido poco estudiado y en general se plantea como poco viable debido al gran tamaño del reactor necesario, sin embargo presenta menores problemas de estabilidad que en los otros rangos de temperatura de operación. El régimen mesofílico es el más estudiado, a pesar de que en la actualidad se está implementando cada vez más el rango termofílico, sin embargo, este último suele ser más inestable a cualquier cambio de las condiciones de operación y presenta mayores problemas de inhibición del proceso (Varnero, 2011).

Independientemente de la temperatura bajo la que opere el biodigestor, ésta debe mantenerse constante una vez que se haya llegado al estado estacionario, aunque puede variar hasta ±0.5°C si se desea obtener una producción constante de biogás. Pequeñas fluctuaciones en la temperatura (±3°C como máximo) pueden tolerarse, especialmente si el proceso se mantiene estable en cuanto a otros parámetros importantes como lo son el pH y la alcalinidad (Schnüer y Jarvis, 2010).



El tiempo de retención hidráulico (TRH) es una medida que describe el tiempo promedio que el sustrato reside en el biodigestor y es igual al volumen de éste dividido entre el flujo diario de entrada (Burke, 2001).

El TRH elegido para una biomasa específica depende de la degradabilidad de la materia orgánica, mientras mayor sea la facilidad de degradación menor será el TRH requerido. El tiempo de retención de sólidos determina la relación entre la cantidad de materia orgánica o de sólidos volátiles que ingresan al biodigestor y la cantidad que sale. Para el tratamiento de RSO, el TRH varía de 3 a 55 días, dependiendo del tipo de biomasa, carga orgánica, temperatura de operación, etapas y configuración de los biodigestores. El TRH típico se encuentra entre 10 y 25 días (Schnüer y Jarvis, 2010).

2.3.3.8. Inhibidores microbianos

Diversos compuestos resultan tóxicos en los sistemas biológicos anaerobios. Los tres más comunes son el amoniaco (NH₃), el sulfuro de hidrógeno (H₂S) y los metales pesados. Existen otros tipos de contaminantes que pueden encontrarse en detergentes domésticos y en compuestos orgánicos antropogénicos complejos (compuestos halogenados, cianuro y fenoles) (Atlas y Bartha, 2002).

El efecto tóxico de los componentes inhibidores depende de su concentración y de la habilidad de las bacterias para adaptarse a las condiciones provocadas (Atlas y Bartha, 2002). La magnitud de la inhibición depende de las diferentes variables fisicoquímicas y la relación de concentración de las sustancias tóxicas en la concentración de las bacterias.

Los indicadores de toxicidad en un biodigestor anaerobio son la desaparición de hidrógeno, la desaparición de metano y la disminución del pH por el aumento de la concentración de ácidos volátiles (Varnero, 2011).



2.4. Modelos matemáticos del proceso de digestión anaerobia

Los modelos matemáticos se han constituido en una herramienta básica para el entendimiento, diseño, operación y control de los sistemas anaerobios y han generado un área activa de investigación. Esto se refleja en un incremento considerable, en los últimos años, en el número de trabajos enfocados al desarrollo de modelos específicos para la digestión anaerobia con el objetivo de mejorar el entendimiento de este complejo sistema y para predecir la respuesta del mismo a los cambios en las diferentes variables que lo afectan (Donoso-Bravo et.al., 2011).

Estos modelos pueden utilizarse como una herramienta para la formulación de estrategias operacionales y de control del sistema ya que buenas estrategias reducen los costos de operación, mejoran la estabilidad del proceso y mejoran la eficiencia del tratamiento así como el rendimiento del mismo. Otros usos potenciales de un modelo incluyen la evaluación de nuevos diseños de reactores y el diagnóstico de los sistemas de bajo rendimiento (Donoso-Bravo et.al., 2011).

2.4.1. Modelos generales

En general, los modelos que describen el proceso de DA se construyen en base a las ecuaciones del balance de masa que utilicen, es decir, en estado estacionario o transitorio, y las expresiones fisicoquímicas de equilibrio. Estas ecuaciones del balance de masa son desarrolladas para los componentes tanto en la fase líquida como en la fase gaseosa de un reactor o biodigestor. Además, se debe tomar en cuenta la transferencia de los gases disueltos a la fase gaseosa y las expresiones de inhibición más relevantes al proceso estudiado.

El principio de conservación para cualquier reactor exige que la masa de la especie *i* en un elemento de volumen *V* obedezca el siguiente enunciado (Smith, 1991):



Velocidad de acumulación en el elemento de volumen_i

- = Velocidad de alimentación al elemento de volumen_i
- Velocidad de salida del elemento de volumen_i
- + Velocidad de producción en el elemento de volumen_i

En el caso de los biodigestores continuos la alimentación se realiza de forma continua, debido a lo cual los lodos y el biogás salen del reactor con un flujo continuo y constante. Dentro del biodigestor, el sustrato se mezcla mediante dispositivos mecánicos o por diferencia de presión, bombeando hacia afuera el material que ha cumplido con el TRH propuesto. En cambio, los biodigestores discontinuos, también llamados "por lotes" o "batch", presentan la característica de ser alimentados una sola vez. En esta configuración se permite la degradación del sustrato hasta que las reacciones cesan o su rapidez se vuelve demasiado lenta, lo cual se determina cuando la producción de biogás disminuye al grado de ser casi nula; cuando esto ocurre, la operación se detiene, los lodos son removidos del biodigestor y pasan a un tratamiento posterior (Deublein y Steinhauser, 2008).

En el caso de un reactor que opera en estado estacionario, no se tiene una acumulación en el elemento de volumen, por lo tanto:

$$\label{eq:constraint} \begin{split} 0 &= Velocidad \; de \; alimentación_i - Velocidad \; de \; salida_i \\ &+ Velocidad \; de \; producción_i \end{split}$$

Las velocidades de alimentación y de salida de los componentes del reactor se definen de la siguiente manera:

$Velocidad \ de \ alimentación/salida = qSi$

Donde q es el flujo y Si es la concentración del componente en el influente o en el efluente.

Por otra parte, la ecuación del balance de masa para cualquier componente (i) en la fase líquida de un reactor intermitente o batch, puede ser escrita como:

 $Velocidad de acumulación_i = Velocidad de formación_i - Velocidad de consumo_i$

Asumiendo una distribución uniforme del compuesto dentro del volumen activo del reactor intermitente, es decir, en condiciones de mezclado perfecto, la velocidad de acumulación puede expresarse como una función del tiempo (Smith, 1991):

$$Velocidad \ de \ acumulación_i = \frac{d(V_L S_i)}{dt}$$

Donde: V_L es el volumen activo (o líquido) en el reactor y S_i es la concentración del componente en la fase líquida.

En ambos tipos de reactores, la velocidad con la que el sustrato es consumido o el producto es formado, es proporcional a la velocidad de crecimiento de las especies microbianas que efectúan las degradaciones, lo cual se traduce en:

$$r_n = Y * Velocidad de crecimiento_i$$

Donde: r_n es la velocidad de consumo de los sustratos y Y es una constante de proporcionalidad.

Se asume que la velocidad de crecimiento de las especies microbianas sigue una cinética de tipo Monod en sustrato limitante, lo cual es descrito por la siguiente expresión:

Velocidad de crecimiento_i = $\mu_i X_i$

$$\mu_i = \frac{\mu_{mi}S_n}{K_{s,n} + S_n} \tag{16}$$

Donde: X_i es la concentración de biomasa microbial, μ_i es el crecimiento específico de X_i, μ_{mi} es el crecimiento específico máximo de X_i, S_n es la concentración limitante del sustrato utilizado por X_i para su crecimiento y K_{s,n} es la constante de saturación media, es decir, el valor de la concentración del sustrato limitante donde la velocidad de crecimiento específico es igual a la mitad de la velocidad de crecimiento específico máximo.

Por otra parte, se produce un consumo o decaimiento de la biomasa, el cual es proporcional a la cantidad de biomasa presente y que es descrito por la siguiente ecuación:

$Velocidad \ de \ decaimiento = -k_d X_i$

Donde: k_d es el coeficiente de decaimiento celular.

Con respecto a la fase gaseosa, el espacio de cabeza del digestor contiene los gases producidos en las reacciones microbianas (hidrógeno, metano y dióxido de carbono) además del vapor de agua. Por lo general se asume que estos gases se comportan como gases ideales y con mezclado perfecto. La presión parcial del agua es igual a la presión de vapor saturado a la temperatura de operación (Batstone, 2002).

La concentración de disolución de equilibrio de los gases es determinada por la ley de Henry. Esta ley es comúnmente expresada como la concentración del gas en la fase líquida debida a la presión parcial de la fase gaseosa.

$$K_H p_{gas,i} - S_{liq,i} = 0 \tag{17}$$

Donde: Sliq,i es la concentración del componente i en la fase líquida en estado estacionario, p_{gas,i} es la presión parcial del componente i en fase gaseosa en estado estacionario y K_H es el coeficiente de la ley de Henry.

La velocidad de transferencia de los gases es expresada como:

$$r_T = k_L a * (S_{liq,i} - K_H p_{gas,i}) \tag{18}$$

Donde: r_T es la velocidad de transferencia de los gases disueltos, $S_{liq,i}$ es la concentración del gas disuelto en la fase líquida y k_La es un coeficiente de transferencia de masa.

El balance de masa para los componentes en el espacio de cabeza, asumiendo comportamiento de gas ideal para cada componente es descrito como:

Velocidad de acumulación

Velocidad de flujo de la fase líquida a la fase gaseosa
Velocidad de flujo fuera del digestor

Acumulación de gas i en espacio de cabeza = $\frac{d(S_{gas,i})}{dt}$



Existen numerosas funciones que pueden ser utilizadas para expresar la inhibición debida al pH. En el modelo ADM1 se utilizan funciones switch, es decir, que su influencia sobre las ecuaciones de velocidad está determinada por una condición, que en este caso es el pH en el sistema (Rosen y Jeppsson, 2006).

2.4.2. El modelo ADM1

El modelo estudiado en este caso ha sido el mejor ejemplo establecido, el cual fue desarrollado por un grupo de especialistas en DA del International Water Association (IWA), Ilamado Anaerobic Digestion Model No.1 o ADM1 y que es ampliamente usado en muchos centros de investigación dedicados al proceso de digestión anaerobia.

El ADM1 es un modelo cinético estructurado de aplicación universal que describe sustratos complejos por sus principales componentes e incluye múltiples pasos que describen los procesos bioquímicos y fisicoquímicos que se llevan a cabo en el proceso anaerobio de biodegradación de compuestos orgánicos complejos, siendo las ecuaciones bioquímicas las que se consideran como la base del modelo (Cendales Ladino, 2011). Su uso permite la descripción matemática de la DA de diferentes tipos de sustratos para la simulación de la producción y composición del biogás producto de ésta.

La finalidad de este modelo fue la creación de una plataforma común para el desarrollo de simuladores aplicables a un amplio rango de procesos específicos por lo que la filosofía de inclusión de procesos y componentes al mismo fue la de maximizar su aplicabilidad manteniendo una estructura razonablemente simple. Es por esto y por sus grandes capacidades en el modelado y cálculo, que desde su desarrollo en 2002 y hasta ahora, el ADM1 ha sido probado y utilizado en una gran variedad de sustratos diferentes sobre los que un gran número de trabajos de investigación y aplicación se han reportado en la literatura (Rivera, 2015).



Este modelo toma en cuenta los procesos de desintegración de sólidos complejos, hidrólisis de partículas orgánicas, degradación de sustrato y crecimiento y muerte de biomasa, además de describir la inhibición de la DA por medio de modelos de inhibición no competitiva (para la inhibición por hidrógeno y amoniaco libre), consumo competitivo (para la competencia entre butirato y valerato) y la inhibición por pH (Batstone, 2002).

En la Figura 4 se muestra el mecanismo de reacción utilizado en el sistema bioquímico del modelo ADM1 donde se muestran los procesos de conversión llevados a cabo en la DA así como los sustratos utilizados y producidos en cada uno de dichos procesos.



Abreviaciones mostradas: AA (aminoácidos), MS (monosacáridos), AGCL (ácidos grasos de cadena larga), LCFA⁻ (equivalente base de LCFA), HVa (ácido valérico), Va⁻ (valerato), HBu (ácido butírico), Bu⁻ (butirato), HPr (ácido propiónico), Pr⁻ (propionato), HAc (ácido acético), Ac⁻ (acetato).

Figura 4. Mecanismo de reacción (Batstone, 2002).



La cinética de primer orden es utilizada en el modelo para simular los procesos de desintegración e hidrólisis de compuestos particulados presentes en el sustrato así como para la descripción de la disminución de la población microbiana. Esta cinética asume que la razón en que se desarrollan estos procesos es proporcional a la concentración del compuesto (Cendales Ladino, 2011).

De forma general el estado de cada componente en la fase líquida puede ser expresado de la siguiente forma:

$$\frac{dS_{liq,i}}{dt} = \frac{q_{in}S_{in,i}}{V_{liq}} - \frac{q_{out}S_{liq,i}}{V_{liq}} + \sum_{j=1-19} \rho_j v_{i,j}$$
(19)

Donde los primeros términos se refieren al influente y efluente del reactor y el último término representa la rapidez de la reacción del proceso *j*.

Sin embargo, cuando se trata de un reactor discontinuo, la ecuación puede ser simplificada como sigue:

$$\frac{dS_{liq,i}}{dt} = \sum_{j=1-19} \rho_j v_{i,j} \tag{20}$$

La composición de los gases es representada mediante la ecuación del balance de masa en el volumen gaseoso del reactor:

$$\frac{dS_{gas,i}}{dt} = -\frac{q_{gas}S_{gas,i}}{V_{gas}} + \rho_{T,i}\frac{V_{liq}}{V_{gas}}$$
(21)



Donde V_{gas} y V_{liq} representan el volumen de la fase gaseosa y líquida del reactor respectivamente.

El modelo utiliza como unidad básica de composición química la demanda química de oxígeno (DQO) y una base molar para componentes sin DQO como lo son el carbono inorgánico (CO₂ y HCO₃) y el nitrógeno inorgánico (NH₄⁺ y NH₃). Las expresiones cinéticas biológicas y los coeficientes de las mismas son presentados en forma de matriz Petersen, las cuales se muestran en el Anexo I, en donde el equilibrio de DQO está implícito en dichas ecuaciones (Batstone, 2002).

Es importante mencionar que debido a que no en todas las etapas de la DA ocurre disminución de la demanda biológica de oxígeno (DBO) es que se utiliza como unidad de composición química la DQO.

Dentro de la estructura del modelo, se han establecido diferentes tipos de parámetros que permiten la interacción entre los coeficientes, variables de estado y constantes específicas, mediante los cuales se describe el comportamiento de una especie o grupo poblacional (Cendales Ladino, 2011).

Se involucran tres tipos de inhibición en el modelo: inhibición por aumento o disminución del pH fuera del rango en el cual se desarrolla la DA, inhibición no competitiva debido a las altas concentraciones de amoniaco e hidrógeno e inhibición competitiva entre consumidores de valerato y butirato (Cendales Ladino, 2011).

Durante la formulación del ADM1, el grupo de trabajo consideró una serie de procesos que no se incluyeron en el modelo ya sea porque no se encontraron con la suficiente frecuencia como para justificar su inclusión en un modelo de base amplia o, en muchos casos, debido a la limitada información disponible en la literatura (Batstone, 2002).

Estas limitaciones se resumen brevemente en la Tabla 6, y son temas sobre los que muchas extensiones y modificaciones del ADM1 se han propuesto para mejorar sus estimaciones y aumentar su capacidad de manejar distintos sustratos sometidos a fermentación, los cuales no son incluidos en el modelo general. Lo anterior demuestra la versatilidad del modelo para describir el complejo proceso de la DA,



así como la aplicabilidad que tiene para describir en forma eficiente el proceso biológico de residuos.

En el presente trabajo se utilizó el modelo original planteado para un reactor intermitente como base para el desarrollo de la herramienta de simulación. En el Anexo II se presenta la nomenclatura y las unidades utilizadas en el modelo así como las ecuaciones desarrolladas para la descripción del proceso.

Tabla 6. Procesos descartados del ADM1 (Batstone, 2002).

Proceso omitido	Parte afectada del ADM1		
Productos alternativos de la glucosa	Estructura bioquímica: regulación de productos de la acidogénesis de la glucosa y alternativos como lactato y etanol.		
Reducción de sulfato e	Estructura bioquímica, fisicoquímica y cinética cuando se		
inhibición de sulfuro	presenta sulfato en la alimentación.		
Nitrato	Estructura bioquímica: principalmente flujo de electrones o canalización; competencia por donadores de electrones y/o aceptores de electrones.		
Inhibición de ácidos y	Cinéticas de inhibición: principalmente a bacterias		
bases débiles	metanogénicas.		
Inhibición por AGCL	Cinéticas de inhibición: principalmente a bacterias metanogénicas.		
Oxidación de acetato	Estructura bioquímica: un grupo adicional puede competir con metanogénicos acetoclásticos para producir hidrógeno a altas temperaturas.		



Proceso omitido	Parte afectada del ADM1	
	Estructura bioquímica: un grupo adicional puede	
Homoacetogénesis	competir con las bacterias metanogénicas que utilizan	
	hidrógeno para producir acetato a bajas temperaturas.	
Precipitación de	Estructura fisicoquímica. Carbono inorgánico, iones	
sólidos	metálicos y nitrógeno inorgánico precipitan a sólidos.	



3. Planteamiento de una solución del ADM1 para FORSU

Las ecuaciones de velocidad de los procesos y estequiometría de las reacciones bioquímicas en el modelo ADM1 son presentadas con el método matricial mientras que las ecuaciones de velocidad de los procesos fisicoquímicos no se incluyen en dicha matriz.

La solución de las ecuaciones formuladas por el modelo depende de si las reacciones ácido-base se implementan como un conjunto de ecuaciones algebraicas implícitas o una serie de ecuaciones de rapidez cinética y ecuaciones diferenciales adicionales. En el primer caso, la solución requiere una forma de resolver un sistema DAE y en el segundo sólo se requiere un solucionador de ecuaciones diferenciales, pero en éste último caso, el conjunto de ecuaciones es más rígido y por ende se introduce un mayor número de errores en la solución. Es por esto que se decidió implementar un sistema DAE (Rosen y Jeppsson, 2006).

El ADM1 es un sistema muy rígido con constantes de tiempo que van desde fracciones de segundo a días. Esto hace que la simulación de un sistema tan desafiante y con el fin de evitar tiempos de simulación excesivamente largos, se debe ser un poco creativo en la aplicación del modelo (Rosen y Jeppsson, 2006).

3.1. Descripción del método matricial

El método matricial representa los términos de reacción para cada componente subdivididos por procesos. Esta matriz, conocida como matriz Petersen, es una descripción completa de los sistemas de reacciones bioquímicas utilizadas en la modelación de reactores de control de la contaminación, así como en sistemas ecológicos (Herbert, 2010). La matriz tiene tantas columnas como el número de componentes relevantes involucrados (productos químicos, contaminantes, biomasas, gases) y tantas filas como el número de procesos involucrados (reacciones bioquímicas y degradación física). Una columna adicional se añade para la descripción de la cinética de cada transformación (ecuación de velocidad).

El principio de conservación de la masa para cada proceso se expresa en las filas de la matriz. Si se incluyen todos los componentes, es decir, ninguno se omite, entonces el principio de conservación de la masa afirma que para cada proceso se establece una relación estequiométrica (Herbert, 2010). Es decir:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\rho_j = 0 \tag{22}$$

Donde a_{ij} es el componente químico *i* en el proceso de la fila *j* para y ρ_j es la densidad o el coeficiente estequiométrico en cuestión.

Además, el efecto de la rapidez de variación de cada componente para todos los procesos simultáneos puede ser fácilmente evaluado mediante la suma de las columnas.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \sum_{i=1}^m a_{ij} r_j \tag{23}$$

Donde r_i son las velocidades de reacción para cada proceso.

Por lo tanto, para cada componente de estado, el balance de masa puede ser descrito como se presenta a continuación:

$$\frac{dVS_{liq,i}}{dt} = q_{in}S_{in,i} - q_{out}S_{liq,i} + V \sum_{j=1-19} \rho_j v_{i,j}$$
(24)

Donde el último término es la suma de las velocidades cinéticas específicas para los procesos *j* multiplicadas por sus correspondientes coeficientes.

Las matrices utilizadas por el modelo para componentes solubles y componentes particulados se presentan en Anexo I.

3.2. Selección de un método numérico

En la selección de un método para resolver numéricamente una ecuación diferencial intervienen muchos aspectos. Los métodos en un paso, en especial el de Runge-Kutta suelen usarse por su exactitud y facilidad de programación, sin embargo, una de sus mayores desventajas es que el lado derecho de la ecuación diferencial debe evaluarse muchas veces en cada etapa (Zill, 2006). Por ejemplo, para el método de Runge-Kutta de cuarto orden se necesitan cuatro evaluaciones de la función en cada paso.

Por otra parte, si se han calculado y guardado las evaluaciones de función en la etapa anterior, con un método multipasos sólo se necesita una evaluación de función por paso, ejemplo de ello es el método Adams-Bashforth. Esto puede generar grandes ahorros de tiempo y costo de programación (Zill, 2006).

Para la solución del sistema DAE del ADM1 se aplicó el método de Adams-Bashforth para la predicción de valores a diferentes tiempos y el método de Adams-Moulton como corrector (método predictor-corrector), es decir, se usa una fórmula para predecir un valor que a su vez se aplica para obtener un valor corregido del mismo.

Como tal, el método de predicción de Adams-Bashforth está definido por las ecuaciones que se presentan a continuación:

$$y_{n+1}^* = y_n + \frac{h}{24} \left(55y'_n - 59y'_{n-1} + 37y'_{n-2} - 9y'_{n-3} \right)$$
(25)

Donde para n≥3:

$$y'_n = f(x_n, y_n) \tag{26}$$

$$y'_{n-1} = f(x_{n-1}, y_{n-1})$$
(27)

$$y'_{n-2} = f(x_{n-2}, y_{n-2})$$
 (28)

$$y'_{n-3} = f(x_{n-3}, y_{n-3})$$
 (29)

Donde: y_n es el valor del estado obtenido del paso de la iteración anterior y y_{n+1}^* es el valor predicho.

En el método de corrección de Adams-Moulton se utiliza la siguiente ecuación con los valores obtenidos con Adams-Bashforth:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} \left(9y'_{n+1} + 19y'_n + 5y'_{n-1} + y'_{n-2}\right)$$
(30)

Donde:

$$y'_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)$$
(31)

Donde: yn+1 es el valor corregido a partir del valor predicho obtenido anteriormente

Como se puede observar en las ecuaciones anteriores, se requiere contar con los valores y₀, y₁, y₂ y y₃ para obtener y₄; estos valores se suelen calcular utilizando el método Runge-Kutta de cuarto orden (Zill, 2006).

El método Runge-Kutta está definido por las ecuaciones que se muestran a continuación:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
(32)

Donde:

$$k_1 = f(x_1, y_1)$$
(33)

$$k_2 = f\left(x_2 + \frac{h}{2}, y_2 + \frac{hk_1}{2}\right)$$
 (34)

$$k_3 = f\left(x_3 + \frac{h}{2}, y_3 + \frac{hk_2}{2}\right)$$
 (35)

$$k_4 = f(x_4 + h, y_4 + hk_3)$$
(36)

Para todas las ecuaciones mostradas, h es el tamaño de paso utilizado en los cálculos.

Como se ha mencionado anteriormente, al solucionar el sistema DAE, el sistema ácido-base se implementa como un conjunto de ecuaciones algebraicas implícitas por lo que para su solución se puede utilizar un método numérico iterativo como lo es el método de Newton-Raphson (Rosen y Jeppsson, 2006).

El método de Newton-Raphson es un método iterativo que permite la aproximación de la solución de una ecuación del tipo f(x)=0 a partir de una estimación inicial de la solución x_0 y construyendo una sucesión de aproximaciones de forma recurrente mediante la ecuación siguiente:

$$x_{j+1} = x_j - \frac{f(x_j)}{f'(x_j)}$$
(37)

Donde: $f'(x_j)$ es la evaluación de la primera derivada de la función $f(x_j)$ (Zill, 2006).

3.3. Modificaciones y adaptaciones realizadas al modelo

La implementación del modelo ADM1 para la DA de la FORSU requiere de la calibración de los parámetros estequiométricos utilizados en las reacciones mediante el análisis de una muestra de la materia a degradar en el laboratorio. Para lograr la reproducción de los resultados experimentales de la mejor manera, esto debe hacerse para cada caso de estudio.

Los parámetros sugeridos en el modelo se han enfocado principalmente en la DA de lodos residuales de PTAR por lo que no todos ellos representan con precisión el proceso de degradación de la FORSU, es por esto que resulta necesario identificar aquellos parámetros cuyo valor no se adapta a la simulación del caso de estudio, principalmente aquellos que describen la composición de la materia orgánica, la desintegración del material complejo y la hidrólisis del material particulado.

En este caso, la calibración del modelo se llevó a cabo utilizando los resultados de la caracterización de una muestra de FORSU realizada en el laboratorio de la UPIIA. Los datos proporcionados por dicho experimento tanto de la caracterización de la muestra como de los resultados obtenidos al llevar a cabo el proceso de DA, se muestran en el Anexo IV.

Con los datos obtenidos en el laboratorio, se pudieron ajustar los parámetros mostrados en la Tabla 7 que están asociados a la composición del sustrato a degradar, es decir, las fracciones de descomposición del material complejo:

Parámetro	Valor ADM1	Valor FORSU
f si,xc	0.1	0.01
f xi,xc	0.25	0.01
f ch,xc	0.2	0.65
f pr,xc	0.2	0.21
f li,xc	0.25	0.12

Tabla 7. Parámetros modificados para FORSU.

Como se observa en la tabla anterior existe una diferencia importante entre ambos grupos de parámetros. Para la FORSU analizada se observa que está principalmente compuesta de carbohidratos y en menor proporción de proteínas mientras que los valores establecidos por el modelo ADM1 representan al sustrato compuesto principalmente de lípidos e inertes particulados. Esto quiere decir que la composición del sustrato y las consecuentes fracciones de productos de la degradación del material complejo de la FORSU no están representados adecuadamente en el modelo, razón por la cual deben ser ajustados a cada muestra analizada.

Adicionalmente, del apartado "Mathematical modeling of batch, single stage, leach bed anaerobic digestion of OFMSW" del libro "Optimization in the Energy Industry" (Lai et. al., 2009) se utilizó el valor de saturación media de hidrógeno sugerido (Ks,h2) de *7.00E-02*. Se decidió utilizar este valor en lugar del propuesto por el modelo original (*7.00E-06*) ya que al ser más grande, matemáticamente permite que la concentración de hidrógeno disuelto que no inhibe la DA sea mayor. Esto es importante ya que el modelo no toma en cuenta que del hidrógeno generado en la fase líquida no todo se encuentra disuelto debido a la simbiosis entre las bacterias acidogénicas y metanogénicas en la que éstas se transmiten unas a otras H₂ sin que éste forme parte de la fase líquida.

Por otra parte, basándose en el artículo "Aspects on ADM1 Implementation within the BSM2 Framework" (Rosen y Jeppsson, 2006), se aplicaron las siguientes correcciones al modelo original publicado en 2002.

- Se agregaron los términos estequiométricos (N_{bac}-N_{xc}) y (C_{bac}-C_{xc}) con los que se hace un seguimiento del destino del exceso de nitrógeno y carbono evitando el desbalance inherente en el modelo original.
- Se realizó la extensión de las ecuaciones estequiométricas para garantizar la consistencia de los balances de masa para nitrógeno y carbono durante el proceso de digestión anaerobia (los valores de los parámetros añadidos se muestran en el Anexo III).

La ecuación para el cálculo del pH sugerida en el modelo para calcular el S_{H+} y, en consecuencia, el pH de la suma de todas los cargas, que se supone es cero, resulta en ecuaciones algebraicas implícitas no lineales que sólo pueden resolverse mediante un método numérico iterativo.

En este mismo artículo, el método de Newton-Raphson es implementado para el cálculo de las concentraciones de pH y las concentraciones de equilibrio. Utilizando este método, el nuevo valor del estado desconocido es calculado en cada paso k de la iteración como:

$$S_{H^+,k+1} = S_{H^+,k} - \frac{E(S_{H^+,k})}{\frac{dE(S_{H^+})}{dS_{H^+}}}$$
(38)

Donde:

$$E(S_{H^+,k}) = S_{cat^+,k} + S_{NH_4^+} + S_{H^+,k} - S_{HCO_3^-,k} - \frac{S_{ac^-,k}}{64} - \frac{S_{pro^-,k}}{112} - \frac{S_{bu^-,k}}{160} - \frac{S_{va^-,k}}{208} - \frac{K_W}{S_{H^+,k}} - S_{an^-,k}$$
(39)

Se realizó esta misma simplificación en el libro de Excel generado para reducir el tiempo de simulación.



4. Elaboración de la herramienta de simulación

Existen diferentes herramientas diseñadas específicamente para la simulación de sistemas dinámicos complejos. Una de las más usadas en universidades y centros de investigación y desarrollo es Simulink, la cual es una plataforma de simulación multidominio de sistemas dinámicos a través de una interfaz basada en bloques, que funciona sobre el entorno de programación de Matlab. Este software tiene un lenguaje de programación propio (lenguaje M) y sus funcionalidades se agrupan en más de 35 "cajas de herramientas" (toolboxes) y paquetes de bloques para Simulink, los cuales se ofrecen de forma independiente posterior a la adquisición de la licencia de Matlab. Debido a estos costos y a la mayor curva de aprendizaje que implica, no cualquiera puede hacer uso de una herramienta de simulación desarrollada en este entorno o adaptarla a sus necesidades específicas.

El mismo escenario se presenta con los diferentes simuladores especializados existentes ya sea por el ambiente o lenguaje en el que están basados así como la posibilidad de su adaptación de un modelo con mayor dilución como es la DA en PTAR a la FORSU como sustrato en dicho proceso.

Es por esto que se utilizó como plataforma para el desarrollo de dicha herramienta Microsoft Excel ya que es uno de los programas de cálculo de más fácil acceso, con diseño intuitivo, funcionalidad simple y asistentes de ayuda para guiar a los nuevos usuarios a través de los procesos más complejos.

En Excel, siendo un software no especializado, se dificulta el planteamiento de sistemas complejos de cálculo y tiene la desventaja de ser incapaz de detectar incoherencias físicas automáticamente, sin embargo, no requiere de conocimientos avanzados o de programación para poder realizar cálculos y modificaciones. Además, aunque no es de libre licencia, debido a su elevado uso a nivel mundial, no requiere de la adquisición de la misma para el funcionamiento de las características básicas necesarias para el correcto funcionamiento de la herramienta de simulación generada.

4.1. Implementación del modelo en Excel

El modelo ADM1 consiste en una serie de ecuaciones diferenciales que dependen de un gran número de parámetros además de estar relacionadas entre sí, por lo que son considerablemente extensas y complejas. Para facilitar su transcripción a Excel, comprensión, modificación y detección de errores en el mismo, se utilizaron diferentes hojas dentro del mismo libro para separarlas en términos más simples, además, de esta manera resulta más sencillo apreciar el comportamiento de las diferentes variables y los componentes que la describen por separado.

A continuación se muestra el esquema general seguido en la implementación y simulación de los procesos bioquímicos y fisicoquímicos que ocurren durante la DA con base en el sistema de ecuaciones planteado por el modelo descrito en The IWA ADM1 presentado en el Anexo II.



Figura 5. Implementación del modelo ADM1 en Excel (Cendales Ladino, 2011).



Para el cálculo de las soluciones de dichas ecuaciones, el método numérico requiere de la selección del tamaño de paso. Mientras menor sea este, mejor será la aproximación a la solución pero el coste computacional será mayor por lo que en este caso se seleccionó como tamaño de paso 0.002 (correspondiente a la variable tiempo, para este caso en días) que junto con el TRH base utilizado de 20 días se traducen en 10,000 iteraciones por hoja.

Esto se decidió así ya que el cálculo de las variables para un mayor número de días implica un mayor número de iteraciones lo que se traduce en un aumento considerable en el tamaño del libro Excel generado lo que resulta en problemas tales como mayor tiempo de cálculo y saturación de la memoria disponible. Por otra parte, la reducción del tamaño de paso genera inconsistencias durante la simulación y los cálculos no pueden ser llevados a cabo correctamente.

Los subproductos de la DA, en general, el digestato, no se incluye en la herramienta de simulación ya que además de que el interés principal del proceso es la obtención de biogás como fuente de energía renovable, como se menciona en la Tabla 6, las ecuaciones cinéticas de precipitación de los diferentes sólidos no fueron incluidas en el modelo debido a la complejidad de las mismas.

4.2. Descripción de la herramienta de simulación

En el Anexo V se muestran algunas imágenes del contenido del libro desarrollado. En la parte inferior de estas imágenes se pueden apreciar las diferentes hojas de las que está compuesto. Se presenta también una descripción de cada una de las hojas que componen el libro de Excel.

Como se aprecia en dicho anexo, se tienen diferentes hojas para cada una de las velocidades de los procesos bioquímicos involucrados y las concentraciones de cada uno de los componentes. Se tienen 19 hojas para evaluar la rapidez de cada uno de los diferentes procesos bioquímicos involucrados (uno por proceso), 24 hojas para evaluar de forma independiente cada una de las 24 variables de



composición en la fase líquida. Para los procesos fisicoquímicos, de igual forma se dividieron las ecuaciones en velocidades de proceso y concentraciones, 3 hojas en las que se evalúa la rapidez de transferencia de cada uno de los gases de la fase líquida a la fase gaseosa, 1 hoja en la que se observa el comportamiento de las presiones parciales y totales y 3 hojas en las que se evalúa independientemente la concentración de dichos variables en la fase gaseosa. Además, se tienen 5 hojas en las que se analiza el comportamiento de cada una de las inhibiciones propuestas por el modelo y 1 hoja exclusiva para el cálculo del pH del sistema y de las concentraciones de equilibrio de los iones presentes.

Finalmente, se incluyen las tablas que contienen los parámetros sugeridos por el modelo original y las matrices en las que no sólo se muestran los coeficientes utilizados, sino también se pueden realizar evaluaciones rápidas del balance de DQO y de las velocidades de los diferentes procesos. En cada una de las hojas del libro se muestra una gráfica del progreso de la variable analizada para así evaluar fácilmente el comportamiento de la simulación.

La primera hoja corresponde al ingreso de las condiciones iniciales con las que se llevará a cabo la simulación, es decir, las concentraciones iniciales de cada uno de los componentes, la temperatura de operación, el pH y los volúmenes, tanto de la fase líquida como de la fase gaseosa, que existen dentro del reactor. También se puede seleccionar el tiempo en que se desea iniciar la simulación así como modificar el tamaño de paso del método numérico para así poder obtener resultados al nivel de detalle deseado. Además de esto, se puede optar por aplicar o no, cada una de las funciones de inhibición a las velocidades de proceso, con el fin de evaluar el efecto de cada una de ellas en el comportamiento de las variables.

Una vez ingresados los datos iniciales en la primera hoja, se puede realizar una revisión de los parámetros bioquímicos y fisicoquímicos empleados para llevar a cabo la simulación en la hoja siguiente y modificarlos según se requiera para cada caso específico, es decir, se debe llevar a cabo la calibración del modelo con la caracterización y análisis de la materia orgánica a procesar.



Se añadió una tercera hoja en la que se tiene la opción de ingresar datos experimentales con los que se desee comparar los resultados obtenidos con la simulación. Esta hoja requiere de la adaptación de tablas y cálculos acordes con los datos a utilizar por el usuario.

Con toda la información ingresada, se realizan los cálculos de las velocidades de proceso, las concentraciones de los componentes, el pH y las inhibiciones correspondientes de manera automática. Las variaciones resultantes se pueden observar fácilmente en las gráficas de los cálculos de las variables en cada punto.

Cuando ya se cuenta con datos experimentales o resultados de algún proceso real, se puede realizar un ajuste de los resultados obtenidos a los datos experimentales, con la finalidad de obtener un modelo ajustado con el cual se pueda predecir de forma más efectiva resultados futuros para sistemas equivalentes de DA.

En la experimentación se utiliza un exceso de degradadores para asegurar la transformación de todo el material utilizado. Usualmente no se realiza la medición de éstos ya que se trata de un proceso complejo y poco práctico. Como el modelo requiere de las concentraciones iniciales de cada uno de los diferentes grupos microbianos para llevar a cabo la simulación, es necesario hacer un ajuste de éstos valores. Para esto, es posible utilizar la herramienta Solver de Excel, que permitirá estimar las concentraciones iniciales de los diferentes degradadores que se tienen como variables. Se debe fijar como objetivo minimizar las diferencias entre el valor experimental y estimado del volumen acumulado de metano de cada punto comparado. Para lograr el mejor ajuste se utiliza la técnica de mínimos cuadrados, donde las diferencias en cada punto son elevadas al cuadrado y la suma de estas diferencias cuadráticas es dividida entre el número de puntos evaluados.



5. Validación de la herramienta de simulación

Una vez que se ha obtenido un conjunto de parámetros calibrados para un sistema en específico, es necesario cuestionar la calidad predictiva del modelo resultante y evaluar la exactitud de dichos parámetros. Esto determinará la confianza detrás del modelo y si es necesario revisarlo. El procedimiento general es llamado validación del modelo.

La validación directa del modelo consiste en revisar si el modelo es capaz de reproducir los datos experimentales que han sido utilizados para la identificación de los parámetros mencionados. Esta es una condición necesaria pero no suficiente para aceptar que el modelo puede reproducir el comportamiento de un sistema a consideración. Puede ser que el modelo se ajuste adecuadamente a los datos que han sido utilizados inicialmente pero no tenga un buen desempeño con datos nuevos (Donoso-Bravo et.al., 2011).

Para asegurar que el modelo tiene un buen desempeño se debe llevar a cabo la comparación de los resultados obtenidos de la simulación realizada con diferentes datos experimentales. Para realizar lo anterior, en este caso se utilizaron los datos publicados en una revista de divulgación científica presentados en el artículo "Semidry mesophilic anaerobic digestion of water sorted organic fraction of municipal solid waste (WS-OFMSW)" (Dong, 2010), del cual se obtuvieron datos de la caracterización inicial de una muestra de FORSU analizada, así como los resultados obtenidos experimentalmente para un reactor batch. Con los datos proporcionados por el artículo, se modificaron las fracciones de descomposición del material complejo, los cuales se muestran en la Tabla 8.

En dicho artículo se reportan tres experimentaciones llevadas a cabo durante 60 días con diferentes porcentajes de sólidos totales en cada reactor (11%, 13.5% y 16%). Utilizando AutoCAD como herramienta de apoyo para dimensionar con mayor precisión la imagen del gráfico de resultados presentado en el artículo, se obtuvieron valores de estas gráficas mostradas en el apartado de resultados, permitiendo con esto el poder realizar una comparación más precisa. En el Anexo VI se presentan

los datos proporcionados por el artículo referido, que fueron utilizados para llevar a cabo la simulación.

Parámetro	Valor ADM1	Valor FORSU
f si,xc	0.1	5E-07
f _{xi,xc}	0.25	5E-07
$m{f}_{ch,xc}$	0.2	0.613636
$oldsymbol{f}_{pr,xc}$	0.2	0.230519
<i>f</i> li,xc	0.25	0.155844

Tabla 8. Parámetros modificados con el artículo.

Las fracciones de descomposición de la literatura consultada, muestran nuevamente que la composición del sustrato analizado difiere de la composición sugerida por el modelo.

En este caso así como se describió en la Tabla 7 se observa que el sustrato está principalmente compuesto de carbohidratos, proteínas y lípidos, en una proporción diferente a la observada en la mencionada tabla, demostrando que estos parámetros deben ser ajustados a cada muestra analizada para describir la descomposición del material complejo de cada sustrato analizado.

6. Resultados y discusión

A continuación se muestran los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas con la herramienta generada en Excel. Para esto, se presentan los gráficos resultantes que son los que permiten visualizar de forma más efectiva la comparativa de datos experimentales contra resultados de la simulación.

6.1. Verificación del método numérico

La solución de las ecuaciones presentadas por el modelo no puede llevarse a cabo analíticamente ya que las variables no pueden ser despejadas para obtener una ecuación explícita. Es por ello que se debe recurrir a métodos iterativos que producen una sucesión de valores aproximados de la solución, que se espera, converjan en ésta. Por otra parte, la rigidez del sistema de ecuaciones dificulta la convergencia de los valores durante la simulación, por lo tanto, es importante verificar que el método numérico calcule adecuadamente dichas aproximaciones.

La ecuación comparada para llevar a cabo la verificación de la precisión del método numérico aplicado, fue la de la concentración de compuestos particulados (X_c) debido a que describe un comportamiento exponencial fácil de analizar. La ecuación que describe esta variable se muestra a continuación:

$$\frac{dX_{c}}{dt} = -k_{dis}X_{c} + k_{dec,X_{su}}X_{su} + k_{dec,X_{aa}}X_{aa} + k_{dec,X_{fa}}X_{fa} + k_{dec,X_{C_{4}}}X_{C_{4}} + k_{dec,X_{pro}}X_{pro} + k_{dec,X_{ac}}X_{ac}$$
(40)
+ $k_{dec,X_{H_{2}}}X_{H_{2}}$

Se considera que todas las constantes de decaimiento (k_{dec,i}) tienen el mismo valor, por lo tanto la ecuación a evaluar es:

$$\frac{dX_c}{dt} = -k_{dis}X_c$$

$$+ k_{dec}(X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{C_4} + X_{pro} + X_{ac} \qquad (41)$$

$$+ X_{H_2})$$

Se puede apreciar que esta no es una ecuación de variables separables, por lo que no tiene una solución analítica exacta. Con el fin de realizar la comparación, se despreció el término de decaimiento, por lo que la ecuación a integrar fue la siguiente:

$$\frac{dX_c}{dt} = -k_{dis}X_c \tag{42}$$

Siendo la solución analítica:

$$X_c = X_c^o e^{t * k_{dis}} \tag{43}$$

Donde: X_c° es la concentración inicial de compuestos particulados, X_c es la concentración de los mismos al tiempo t y k_{dis} es la constante de desintegración.

En las Figuras 6 y 7 se muestran las gráficas resultantes de la comparación de las soluciones analítica y numérica de la ecuación descrita anteriormente.



Figura 6. Solución analítica vs. solución numérica.



Figura 7. Acercamiento de solución analítica vs. solución numérica.

Como se puede apreciar, se obtienen los mismos valores para ambas soluciones. Evaluando el error cuadrático medio se obtiene un valor muy cercano a 0 de 1.45775E-25, por lo tanto se puede afirmar que el método utilizado resulta muy adecuado para solucionar el sistema de ecuaciones planteado por el modelo ADM1 y describir adecuadamente el proceso de DA.

6.2. Simulación con datos de experimentación de laboratorio

Con los datos experimentales de un proceso de DA de FORSU obtenidos y proporcionados por la Unidad de Proyectos y de Investigación en Ingeniería Ambiental (UPIIA) de la Facultad de Química UNAM para la realización del presente trabajo, se llevó a cabo la simulación del proceso de DA para efectuar la calibración del modelo implementado en Excel.



6.2.1. Condiciones iniciales experimentales para la simulación

En la sección 3.3 se menciona que se utilizaron los datos experimentales proporcionados por la UPIIA para llevar a cabo la calibración de la herramienta de simulación. Para ello se utilizan los resultados obtenidos de la caracterización de las muestras de FORSU en la que se determina la relación de sus diferentes componentes. Dicha relación de componentes permite ajustar los parámetros mostrados en la Tabla 7, los cuales describen la forma en que se desintegrará la materia orgánica ingresada a un reactor. Estos parámetros se ingresan a la herramienta de simulación junto con los valores iniciales de la experimentación realizada. Las condiciones del reactor en el que se llevó a cabo la experimentación y que fueron utilizadas para llevar a cabo la simulación se muestran en la Tabla 9.

Descripción	Nomencl.	Unidades	Valor
рН	рН	Adim.	7
Tiempo de residencia	TRH	d	17
Temperatura de operación	T _{op}	°C	37
Volumen de fase líquida	V _{liq}	m ³	0.0003
Volumen de fase gas	V _{gas}	m ³	0.0001

Las condiciones iniciales ingresadas en la herramienta elaborada en Excel para realizar la simulación se muestran en la Tabla 10.

Como se asume que al ingresar al reactor, la FORSU se encuentra como material complejo, las concentraciones iniciales de las moléculas simples (monosacáridos, aminoácidos, AGCL, propionato, acetato, carbohidratos, proteínas y lípidos) se consideran igual a cero, ya que serán producto de la descomposición de las moléculas más complejas y de las diferentes reacciones metabólicas llevadas a

cabo. Los gases hidrógeno y metano igualmente serán generados en el transcurso del proceso, por lo que sus concentraciones iniciales son también igualadas a cero.

Comp (i)	Descripción	Nomonol	Unidedee	Concentración
Comp.(I)	Descripcion	Nomenci.	Unidades	inicial (S ₀ , X ₀)
4	Valerato total	S _{va}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.00E-08
5	Butirato total	S_{bu}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.00E-08
10	Carbono inorgánico	S _{IC}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.19297306
11	Nitrógeno inorgánico	SIN	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.00E-08
13	Material complejo	Xc	$\frac{kgDQO}{m^3}$	33.12640452
17	Degradadores de azúcar	X_{su}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.617322176
18	Degradadores de aminoácidos	X _{aa}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.480916145
19	Degradadores de AGCL	X _{fa}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.832454003
20	Degradadores de valerato y butirato	X _{C4}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.18941231
21	Degradadores de propionato	X _{pro}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.855974498
22	Degradadores de acetato	X _{ac}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	3.145845239
23	Degradadores de hidrógeno	X _{H2}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.014797758

Tabla 10. Condiciones iniciales en la herramienta de simulación.

De igual forma, se considera que el valerato y butirato no están presentes al ingresar al reactor, pero debido a que existe una función inhibidora de competencia entre estas dos especies, expresada por una división de ambas concentraciones, se

59



ingresaron valores aproximados a cero para evitar conflictos matemáticos en la simulación.

Los cálculos se ven afectados de forma similar con el valor de la concentración inicial de nitrógeno inorgánico (Sin), debido a la función de inhibición que afecta todos los consumos de sustratos cuando éste no se encuentra presente. De manera general se desprecia la concentración de nitratos presentes en el sustrato, ya que es rápidamente utilizado por las bacterias facultativas como receptores de electrones a falta de oxígeno en el sistema anaerobio.

En el caso de la concentración de carbono inorgánico, se calculó la concentración de equilibrio como valor inicial, ya que, debido al principio de Le Châtelier, la falta de este compuesto en la alimentación ocasiona que el sistema descrito en la sección 2.3.2.1 se ajuste hasta alcanzar un nuevo equilibrio, lo que implica la solubilización de CO₂, pero al no producirse aún éste al inicio del proceso, se generan inconsistencias matemáticas en la herramienta de simulación tales como valores de concentraciones negativas, lo que provoca la desestabilización de todos los cálculos.

La cantidad de inertes solubles y particulados se presenta como inexistente al ingreso de un reactor ya que se asume que las muestras han pasado por un proceso riguroso de separación de materia orgánica a degradar, para así obtener mejores resultados en la experimentación.

En el Anexo IV se menciona que en la preparación de las muestras se utiliza un inóculo de lodos anaerobios de tipo granular que se mezclan con la FORSU en una relación de 2:1, sin embargo, no se proporcionan datos acerca de las cantidades en que cada una de las diferentes especies de degradadores se encuentra presente. Este tipo de caracterizaciones microbianas resulta complicada e impráctica, por lo que es común que no se lleve a cabo. Como el modelo requiere de la especificación de estas variables iniciales para el proceso, es preciso realizar un ajuste de la concentración inicial de los diferentes degradadores de materia al no contar con estos datos de manera experimental. En este caso, se llevó a cabo el ajuste de estos valores utilizando la herramienta Solver como se describe en la sección 4.2.



6.2.2. Comportamiento de las variables simuladas

Con los valores iniciales descritos anteriormente, se realizó la simulación de la variación de las concentraciones de todas las especies involucradas en el proceso, tanto en la fase líquida como en la fase gaseosa. Se activaron las inhibiciones debidas a pH, nitrógeno inorgánico y amoniaco al realizar la simulación.

A continuación se presentan las gráficas más representativas del comportamiento de las variables analizadas al llevar a cabo la simulación del proceso de DA con las condiciones iniciales mostradas anteriormente.



6.2.2.1. Fase líquida

Figura 8. Concentración de material complejo.

Como ya se ha dicho, se considera que toda la materia orgánica ingresada está conformada por moléculas complejas, que han de ser descompuestas por los microorganismos presentes en el sistema. Esta transformación es la que se observa
en la Figura 8, en la que disminuye la concentración de este material conforme se descompone en moléculas más simples.

En la Figura 9 se observa una gráfica de la formación y consumo de los sustratos correspondientes a cada etapa.



Similares: S_{su} , S_{aa} , S_{fa} , S_{va} , S_{bu} , S_{pro} , S_{ac} , S_{H2} , S_{CH4} , X_{ch} , X_{pr} y X_{li} .

Figura 9. Concentración de monosacáridos.

Las concentraciones de las moléculas que se obtienen a partir de la degradación consecutiva de la materia orgánica compuesta, presentan un comportamiento similar al mostrado en la Figura 9. Esto se debe a que continuamente los productos de una etapa se convierten en los sustratos de la siguiente aumentando sus concentraciones al ser generados y disminuyendo conforme se consumen. En el caso de los carbohidratos (X_{ch}), proteínas (X_{pr}) y lípidos (X_{li}), estos aumentan su concentración inicial al ser producto directo de la desintegración de los compuestos particulados; posteriormente son hidrolizados enzimáticamente para producir monosacáridos (S_{su}), aminoácidos (S_{aa}) y ácidos grasos de cadena larga (S_{fa})

respectivamente, los que a su vez son los precursores de valerato (S_{va}), butirato (S_{bu}), propionato (S_{pro}) y acetato (S_{ac}) durante la etapa acidogénica. Estos últimos forman posteriormente hidrógeno (S_{H2}) y una mayor cantidad de acetato en la etapa acetogénica para finalmente producir metano (S_{CH4}) en la etapa metanogénica.

En la Figura 10 se muestra el crecimiento de los degradadores de monosacáridos (X_{su}). El comportamiento de las diferentes poblaciones microbianas se ve representado por una gráfica similar.



Similares: X_{su}, X_{aa}, X_{pro}, X_{fa}, X_{C4}, X_{H2} y X_{ac}.

En esta figura se describe el tamaño de las poblaciones microbianas, el cual dependerá de la cantidad de sustrato disponible para su supervivencia y crecimiento. Al inicio de la DA existe una cantidad de sustrato disponible suficiente para permitir el crecimiento de los diferentes consumidores. Estos llegan a un máximo cuando se ven afectados por las limitaciones de espacio y cuando la relación sustrato/consumidor disminuye conforme se llevan a cabo las diferentes degradaciones de cada etapa, por lo que, poco a poco, la biomasa muere y es sujeta

Figura 10. Concentración de degradadores de monosacáridos.

a un decaimiento en el que pasa a formar parte del material complejo que puede ser nuevamente degradado como se describió anteriormente.

En la Figura 11 se muestra la variación de la concentración de nitrógeno (S_{in}) inorgánico. Se obtiene un comportamiento similar para la concentración de amoniaco (S_{NH3}) e inertes solubles y particulados (S_i y X_i).



Similares: S_{in}, S_i, S_{NH3} y X_{i.}

Figura 11. Concentración de nitrógeno inorgánico.

La acumulación de nitrógeno inorgánico en la fase líquida (S_{in}) mostrada en la Figura 11, es debida a la omisión en el modelo de los procesos de desnitrificación, es decir, la reducción de nitratos hasta nitrógeno gaseoso, y el de precipitación de los compuestos formados a partir de los iones de nitrógeno inorgánico que reaccionan en la fase líquida.

Un comportamiento similar se observa en la concentración de amoniaco (S_{NH3}) ya que ésta aumenta continuamente debido a la desintegración de los aminoácidos provenientes de las proteínas. Este aumento se da paulatinamente ya que como se

describe en la sección 2.3.2.1, el amoniaco se disuelve en el agua formando el ion amonio, el cual a su vez, reacciona con los ácidos disueltos neutralizándolos, lo cual resulta importante debido a la continua formación de CO₂.

Aquella fracción de la materia orgánica que no puede ser degradada o utilizada en la producción de metano, se acumula en el sistema como inerte soluble o particulado, de la cual se obtiene una gráfica similar a la mostrada en la Figura 11. Estos inertes pueden ser iones metálicos que no fungen como nutrientes para las bacterias, moléculas demasiado complejas que no pueden descomponerse en el tiempo de reacción (como las fibras) e incluso tierra y cenizas presentes en la alimentación.



Figura 12. Concentración de carbono inorgánico.

La concentración de carbono inorgánico del sistema (S_{ic}) mostrado en la Figura 12 aumenta debido al CO₂ formado que se solubiliza generando ácido carbónico (H₂CO₃) que a su vez forma los iones bicarbonato (HCO₃⁻) y carbonato (CO₃²⁻) como se muestra en el siguiente equilibrio químico:

$$CO_2 + H_2O \leftrightarrow H_2CO_3 \leftrightarrow H^+ + HCO_3^- \leftrightarrow H^+ + CO_3^{2-}$$
(44)

Este incremento en la concentración es pequeño ya que al estar presente el NH₃ en el sistema, neutraliza los ácidos mencionados contribuyendo a la alcalinidad dentro del reactor. El producto de esta neutralización es un precipitado que, al no estar incluido este proceso en el modelo, se acumula en la fase líquida.

Al transferirse el CO₂ formado en la fase líquida a la fase gaseosa y solubilizarse por el mecanismo ya descrito, la concentración del dióxido de carbono en la fase líquida (S_{CO2}) disminuye como se muestra en la Figura 13.



Figura 13. Concentración de dióxido de carbono en fase líquida.

El aumento en el pH del sistema que se observa en la Figura 14 se mantiene dentro del intervalo de operación recomendado en la sección 2.3.3.1.



Figura 14. Variación de pH en el sistema.

Generalmente durante el proceso de DA el pH tiende a disminuir debido a la continua producción de CO₂, sin embargo, de los resultados de la simulación se obtiene un aumento en el pH del sistema mostrado en la Figura 14. Este aumento se debe principalmente al incremento en la concentración de NH₄⁺. De acuerdo con el equilibrio descrito en la sección 2.3.2.1., esto indica que se tiene un comportamiento básico del NH₃.

6.2.2.2. Fase gaseosa

En la Figura 15 se observa la rapidez de transferencia del metano formado en la fase líquida a la fase gaseosa, se observa un comportamiento similar para la transferencia de CO₂ y H₂. Como se menciona en la Tabla 3, el biogás generado está compuesto principalmente de CO₂ y CH₄, además de tener trazas de otros gases. En el modelo sólo se considera al gas H₂ ya que tiene una influencia importante dentro del proceso en la fase líquida. Se considera además la presencia







Figura 15. Rapidez de transferencia de gas metano de la fase líquida a la fase gaseosa.

La comparación de los resultados obtenidos con los datos experimentales proporcionados por el laboratorio se muestra en la Figura 16. Ya que el metano es el componente principal del biogás generado por el proceso de DA, es éste el que se utiliza como parámetro de comparación. Como se puede observar, el comportamiento de las gráficas difiere ligeramente entre los días 2 y 8 lo que se debe principalmente a las diferencias entre las proporciones de los diferentes microorganismos que participan en el proceso. Sin embargo, la cantidad estimada de metano acumulado es muy cercana a aquella obtenida experimentalmente, por lo que se puede decir que con el modelo se obtienen buenos resultados que permiten acercarse a la predicción del comportamiento del proceso experimental.



Figura 16. Metano generado en fase gaseosa (experimental vs estimado).

Se muestra la composición obtenida del biogás generado en la herramienta de simulación en la Figura 17, en la cual se mantiene una composición aceptable de CH₄ y CO₂ (CH₄: 56.32%, CO₂: 35.55%), cuyos valores se encuentran acordes a los valores típicos encontrados en el biogás.

La composición del biogás depende del material digerido y de la eficiencia del proceso. Cuando el biogás tiene un contenido de metano superior al 45% es inflamable, mientras mayor sea el contenido de metano, mayores serán las cualidades energéticas del biogás. En la Figura 17 se observa que la composición estimada del biogás generado se acerca al 60% en metano, por lo que se puede decir que el metano generado resulta adecuado para su uso como combustible.



Figura 17. Composición estimada del biogás.

Como se muestra en la memoria de cálculo en el Anexo VII, la concentración de biomasa utilizada en la experimentación fue de 72.808 kgDQO/m³ mientras que en el mejor ajuste realizado en la simulación se obtiene una suma de las concentraciones de 9.1367 kgDQO/m³. Resulta evidente que la suma de las concentraciones iniciales ajustadas de los diferentes degradadores es mucho menor a la que se reporta en la experimentación. Esto se debe a que el modelo no toma en cuenta el exceso de biomasa que se ingresa en la experimentación con el fin de asegurar la degradación completa de la materia orgánica y que debido a las limitaciones de superficie de contacto no toda puede acceder a los sustratos y llevar a cabo las reacciones metabólicas correspondientes al mismo tiempo; en cambio, solamente considera la relación proporcional entre la concentración de degradadores y la rapidez de consumo de los respectivos sustratos, es decir que mientras mayor sea la cantidad de biomasa inicial mayor será la rapidez con la que se consumen los sustratos en la simulación, sin embargo, esto no sucede así en la realidad por lo que se generan inconsistencias en los cálculos y los resultados obtenidos describen con menor precisión el proceso llevado a cabo.

6.3. Validación de la herramienta de simulación

Se llevaron a cabo las simulaciones para las experimentaciones reportadas en el artículo "Semi-dry mesophilic anaerobic digestion of water sorted organic fraction of municipal solid waste (WS-OFMSW)" (Dong, 2010) de 11% y 13.5% de sólidos totales en el reactor durante 40 días de operación. Con los datos mostrados en el Anexo VI se realizó la comparación de los datos experimentales extraídos con los datos obtenidos a partir de la simulación.

6.3.1. Condiciones iniciales para la simulación

Como se menciona en la sección 5 se utilizó el artículo científico para llevar a cabo la validación de la herramienta de simulación generada, es decir, comprobar que el modelo implementado permite la correcta descripción del proceso, no sólo para el caso experimental con el cual fue calibrado.

Las condiciones de experimentación, así como las composiciones iniciales reportadas en el artículo analizado para la validación, fueron ingresadas a la herramienta de simulación, estos valores se muestran en las Tablas 11 y 12.

Descripción	Nomencl.	Unidades	Valor
рН	рН	Adim.	7
Tiempo de Residencia	TRH	d	40
Temperatura de operación	T _{op}	К	303.15
Volumen de fase líquida	V_{liq}	m ³	0.02625
Volumen de fase gas	V_{gas}	m ³	0.00875

Tabla 11. Datos del reacto	[.] para la validación	(Dong,	2010).
----------------------------	---------------------------------	--------	--------

				Concentración	Concentración
(i)	Descripción		Unidades	inicial 11%ST	inicial 13.5%ST
				(S ₀ , X ₀)	(S ₀ , X ₀)
4	Valerato total	S _{va}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	1.00E-08	1.00E-08
5	Butirato total	S_{bu}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	1.00E-08	1.00E-08
10	Carbono inorgánico	SIC	$\frac{kmolC}{m^3}$	0.19441	0.19441
11	Nitrógeno inorgánico	S _{IN}	$\frac{kmolN}{m^3}$	1.00E-08	1.00E-08
13	Material complejo	Xc	$\frac{kgCOD}{m^3}$	67.69753	98.93476
17	Degradadores de azúcar	X_su	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.19388	0.01035
18	Degradadores de aminoácidos	X _{aa}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.00005	0.06006
19	Degradadores de AGCL	X _{fa}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.00083	0.00003
20	Degradadores de valerato y butirato	X _{C4}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.04011	0.02465
21	Degradadores de propionato	X _{pro}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.11482	0.10437
22	Degradadores de acetato	X _{ac}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.03012	0.00039
23	Degradadores de hidrógeno	X _{H2}	$\frac{kgCOD}{m^3}$	0.00018	0.00025

Tabla 12. Condiciones iniciales en la herramienta de simulación.

En dicho artículo (Dong, 2010) se realizan tres experimentaciones con diferentes concentraciones de sólidos totales dentro de cada reactor durante 60 días. Solamente se llevó a cabo la simulación de dos experimentaciones (11% y 13.5%) con un tiempo de 40 días ya que como se mencionó en la sección 4.1, el tamaño de paso seleccionado permite al método numérico una mejor convergencia pero



también ocasiona que el tamaño del archivo sea muy grande y se tengan problemas con el software, por lo tanto sólo se aumentó el tamaño de paso a 0.004.

Con las características de la MO mostradas en el Anexo VI, se determinaron los valores de las fracciones de descomposición del material complejo, los cuales se muestran en la Tabla 8. Las condiciones de operación del reactor se ingresaron conforme a lo descrito en el artículo.

Para las concentraciones iniciales de los diferentes compuestos, se realizaron las conversiones y cálculos correspondientes para poder determinar los valores de éstas. Al igual que en el caso experimental, se asume que lo que se ingresa al reactor es material complejo por lo que el valor inicial para esta variable es la suma de las concentraciones de carbohidratos, proteínas y lípidos dadas por el artículo y las concentraciones de las moléculas más simples se fijaron a cero excepto para las concentraciones de valerato, butirato y nitrógeno y carbono inorgánico por las razones expuestas anteriormente. Estas concentraciones se muestran en la Tabla 12 donde también se muestra el mejor ajuste obtenido con Excel para las concentraciones de los diferentes degradadores.

6.3.2. Comparación del comportamiento de las variables simuladas

A continuación se muestran las gráficas presentadas por el artículo "Semi-dry mesophilic anaerobic digestion of water sorted organic fraction of municipal solid waste (WS-OFMSW)" (Dong, 2010), seguidas de la gráfica de la misma variable analizada y obtenida al llevar a cabo la simulación en Excel para ambas experimentaciones evaluadas.

Como en el artículo sólo se muestran resultados de las experimentaciones en forma gráfica, se utilizó AutoCAD con el fin de obtener una aproximación de los resultados numéricos puntuales a partir de éstas para así realizar una mejor comparación. La falta de datos y de las desviaciones de los mismos, dificulta su comparación y discusión. Se comparó el comportamiento de las variables más importantes del



proceso: pH, producción acumulada de metano y composición del biogás generado. Se activaron las inhibiciones debidas a nitrógeno inorgánico y amoniaco al realizar la simulación.

• ST=11%

En las Figuras 18 y 19 se muestra la variación del pH reportado en el artículo y el obtenido en la simulación.



Figura 18. pH experimental 11%ST (Dong, 2010). Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.

Se observa que la simulación del pH para la experimentación con 11% de ST resulta con grandes diferencias con respecto al mostrado por el artículo. En la Figura 18 el pH máximo alcanzado en la experimentación es de 7.4 y el mínimo es de 6.905 mientras que en la Figura 19 el pH máximo simulado es de 8.11 y el mínimo es de 4.97. La alta formación de AGVs (valerato, butirato, propionato y acetato) ocasiona la acidificación del sistema y por tanto la caída del pH el cual aumenta nuevamente

una vez que estos se han consumido, de haberse activado la inhibición debida al pH no se hubieran obtenido resultados ya que el proceso se detiene por completo.



Figura 19. pH simulado 11%ST.

En la experimentación se puede apreciar la oscilación del pH en la neutralidad a pesar de también presentar una alta producción de AGVs. Por la comparación de ambos comportamientos, se especula que durante la experimentación se llevó acabo un control de este parámetro mediante la adición de una base (lo que es típico en experimentaciones de DA a nivel laboratorio o incluso a nivel industrial) siendo el comportamiento observado en la Figura 19 el que se hubiera obtenido de no haberse realizado dicho control.

Las Figuras 20 y 21 muestran la concentración de los diferentes AGVs formados en el sistema experimentalmente y en la simulación.



Figura 20. Concentración de AGVs experimental 11%ST (Dong, 2010). Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



Figura 21. Concentración de AGVs simulada (Dong, 2010).

La conversión de la concentración máxima aproximada de AGVs producidos, mostrados en la Figura 18 es de 4250 mg/L a 6.43 kgDQO/m³ (Anexo VII),



considerando al propionato como el principal contribuyente a este valor, como se muestra en la Figura 20; en contraste, en la Figura 21 se muestra que la concentración de acetato es mayor en la simulación realizada y la concentración máxima de AGVs es de 29.60 kgDQO/m³. Esta diferencia se debe a que las concentraciones ajustadas de los degradadores de propionato es mayor que la de los degradadores de acetato lo que significa que es generada una mayor cantidad de acetato de la que es consumida.

En la Figura 23 se observa la comparación de la producción acumulada de metano del artículo como se muestra en la Figura 22 y la simulación realizada. Se puede apreciar que los comportamientos de las producciones de metano experimental y estimado son muy cercanos en casi todos los puntos de la gráfica por lo que se puede afirmar que la simulación llevada a cabo describe correctamente la formación de metano en las condiciones descritas.



Figura 22. Producción de gas acumulada 11%ST (Dong, 2010). Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



Figura 23. Producción de metano acumulada simulada 11%ST.

El comportamiento de las composiciones del biogás obtenidas experimentalmente y en la simulación se muestra en las Figuras 24 y 25.



Figura 24. Composición del biogás generado (Dong, 2010) 11%ST.

Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



Figura 25. Composición del biogás simulado 11%ST.

Con respecto al biogás, una comparación cualitativa de las Figuras 24 y 25 permite apreciar que las concentraciones de los diferentes gases que lo componen describen comportamientos similares. En los resultados experimentales se reporta una composición máxima de metano de 71% y 20% CO₂ en el día 15, mientras que en la simulación se obtiene un 84.81% de metano y 9.56% en el día 13. Al cabo del día 40 experimentalmente se reporta una composición de 56% CH₄ y 40% CO₂ mientras que de la simulación se obtiene una composición de 61.11% CH₄ y 33.17% CO₂. A pesar de las diferencias entre los resultados de ambos comportamientos, la simulación realizada permite obtener una aproximación a la composición del biogás obtenido. La alta concentración de hidrógeno que se aprecia en la Figura 25 al inicio de la simulación afecta a las bacterias acidogénicas y por ende a las bacterias metanogénicas, limitando la producción de CO₂ y CH₄ ocasionando el comportamiento de la composición del biogás simulado mostrado en esta figura.

• ST=13.5%

Así como para las experimentaciones con 11% de ST, en las Figuras 26 y 27 se observa la variación del pH reportado en el artículo y el obtenido en la simulación para un reactor con 13.5% de ST.

50

En el caso de la simulación del experimento realizado con 13.5% de ST se obtiene un comportamiento diferente para el pH experimental y el estimado. De la Figura 26 se obtiene un pH máximo de 7.15 y un mínimo de 7.05 mientras que en la figura 27 se observa que el pH máximo es de 8.36 y el mínimo de 4.68. Resulta evidente que este intervalo de variación no es óptimo para que se lleve a cabo la DA. Al igual que en el caso de la experimentación con 11% de ST, la acidificación del sistema es ocasionada por el aumento en la concentración de AGVs en el sistema pero resulta más pronunciado debido a la mayor cantidad de ST dentro del reactor.



Figura 26. pH experimental 13.5%ST (Dong, 2010). Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



j OO

Figura 27. pH simulado 13.5%ST.

Las Figuras 28 y 29 muestran la concentración de los diferentes AGVs formados en el sistema experimentalmente y en la simulación.



Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



60

Figura 29. Concentración de AGVs simulada.

Al igual que en la experimentación con 11% de ST la concentración total de los AGV producidos es mayor en la simulación con la contribución principal del acetato como se muestra en las Figuras 28 y 29. De la Figura 28 se obtiene una concentración aproximada de 6750 mg/L que convertida a las unidades utilizadas de 10.210 kgDQO/m³ en el sistema (mayormente propionato) mientras que en la simulación se obtiene una concentración de 52.14 kgDQO/m³ de los mismos como se muestra en la Figura 29.

La gráfica en la que se muestra el metano obtenido experimentalmente en el artículo se presenta en la Figura 30. La comparación entre las cantidades de metano obtenidas experimentalmente y con la herramienta de simulación se muestra en la Figura 31.



60







Figura 31. Producción de metano acumulada simulada 13.5%ST.

En la Figura 31 se aprecia que los comportamientos puntuales de las producciones de metano experimental y estimado presentan comportamientos diferentes y los



resultados obtenidos con la simulación no se acercan a los datos experimentales reportados por lo que se puede afirmar que en este caso la simulación llevada a cabo no representa correctamente la formación de metano bajo las condiciones analizadas debido al aumento significativo de la cantidad de sólidos totales en el sistema.

El comportamiento de las composiciones del biogás obtenidas experimentalmente y en la simulación puede compararse con las Figuras 32 y 33.

El comportamiento de las composiciones de los gases que forman el biogás mostrado en la Figura 32 no se obtiene con la simulación realizada, los resultados obtenidos de ésta se muestran en la Figura 33. Debido a que el pH simulado de operación es muy bajo es que se obtienen estas diferencias, al ser menor éste, se propicia una mayor formación de CO₂.



Figura 32. Composición del biogás generado (Dong, 2010) 13.5%ST. Copyright 2009 por Elsevier Ltd. Reimpresión autorizada.



Figura 33. Composición del biogás simulado 13.5%ST.

Cabe mencionar que para la experimentación con mayor contenido de ST se presenta una menor producción de biogás y con una composición ligeramente menor de metano, lo que no se obtiene al simular ambos procesos. Es aquí donde factores que no han sido modelados, como las limitaciones de transferencia de los diferentes componentes a través de la fase líquida y hacia la fase gaseosa debido al aumento de la cantidad de sólidos, se vuelvan relevantes en el proceso y requieran de una descripción matemática para acercar las predicciones al comportamiento real.

Como se mencionó anteriormente, se llevó acabo un ajuste de las concentraciones iniciales de los diferentes degradadores que participan en la DA, utilizando la herramienta de Solver de Excel. En la Tabla 14 se presentan los errores cuadráticos calculados obtenidos para dicho ajuste. Se puede apreciar que conforme mayor es la cantidad de sólidos en el reactor, la desviación de la simulación con respecto a los resultados experimentales es mayor debido a aspectos físicos que no han sido incluidas en el modelo.



En la Tabla 13 se muestran los últimos valores de metano acumulado para las simulaciones realizadas y el error obtenido al compararlos con los valores experimentales correspondientes.

	CH₄ acum.	CH₄ acum.	Error
	Reportado (m ³)	Simulado (m ³)	porcentual
Experimental (10% ST)	0.003273	0.00327997	0.2
Dong. 11% ST	0.515126	0.506209828	1.7
Dong. 13.5% ST	0.547758	0.609280486	11.2

Tabla 13. Comparación del error obtenido con las diferentes simulaciones.

Se puede apreciar que conforme aumenta la cantidad de sólidos dentro del sistema de reacción los resultados que se obtienen con la herramienta de simulación se alejan del proceso real, es decir, el error de dichos resultados tiene una relación directamente proporcional con la cantidad de solidos totales dentro del reactor. Sin embargo, el error obtenido para las simulaciones realizadas se encuentra en un rango aceptable de acuerdo a lo reportado en la literatura (Atallah et.al., 2014), por lo que se puede afirmar que la herramienta de simulación generada resulta adecuada para describir el comportamiento de la DA de FORSU con una dilución alrededor del 13.5%.

7. Conclusiones

Se generó una herramienta de simulación del proceso de digestión anaerobia a partir de la implementación del modelo ADM1 en Excel, el cual es fácilmente modificable y adaptable a cada caso específico de digestión de FORSU.

Mediante la calibración experimental de los parámetros estequiométricos y fisicoquímicos se logró describir la transformación de la materia orgánica a biogás y realizar una predicción aproximada del comportamiento de las variables involucradas en el proceso de tratamiento de FORSU.

Asimismo, se llevó a cabo la simulación de datos experimentales con FORSU diluida al 10% con un error de 0.2% y la validación de dicha herramienta con datos reportados en un artículo científico que utiliza una concentración de residuos sólidos de 11% y 13%, para estas simulaciones los errores cuadráticos obtenidos fueron de 1.7% y 11.2% respectivamente.

Las simulaciones realizadas se ven limitadas por la concentración inicial y actividad de los diferentes degradadores que participan en el proceso, así como por la alta concentración de hidrógeno disuelto calculado en la fase líquida del sistema. Estas limitaciones generan complicaciones de cálculo y no representan el comportamiento que tienen estas variables en la realidad.

La incorporación de sistemas matemáticos que restrinjan las velocidades de reacción de la población microbiana con relación a su concentración en el sistema y las limitaciones físicas de su actividad en el mismo, generará una descripción del proceso más cercana a la realidad. De igual forma, se debe ajustar el balance del hidrógeno generado en el que se considere la simbiosis entre las bacterias acidogénicas y metanogénicas, en la que este compuesto se transfiere de una especie a otra sin prácticamente estar disuelto en el sistema, acercará las simulaciones al comportamiento de este compuesto en un sistema real.

8. Bibliografía

- Atallah, N.M., El-Fadel, M.E., Ghanimeh, S.A., Saikaly, P., Abou Najm, M.R. (2014). Performance optimization and validation of ADM1 simulations under anaerobic thermophilica conditions. Bioresource Technology, 174: 243–255.
- 2 Atlas, R.M. & Bartha, R. (2002). Ecología microbiana y Microbiología ambiental. Madrid: Pearson, 4^a Ed.
- Batstone, D.J. y Jensen, P.D., (2011). Anaerobic processes. En Wilderer, P.
 Treatise on water science. Amsterdam: Elsevier B.V.
- 4 Batstone, D.J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyzhnyl, S.V., Paviostathis, S.G., Rozzi, A., Sanders, W.T.C., Siegrist, H. & Vavilinm V.A. (2002). The IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1), Wat. Sci. Tech, Scientific Report No. 13.
- 5 Burke, P.E.D.A., (2001). Dairy Waste Anaeroic Digestion Handbook. Olympia, WA. Environmental Energy Company.
- 6 Bustamante, M.A., Restrepo, P.A., Albuquerque, J.A., Pérez-Murcia, M.D., Paredes, C., Moral, R. & Bernal, M.P., (2013). Recycling of anaerobic digestates by composting: effect of the bulking agent used. Journal of Cleaner Production 47: 61-69.
- 7 Carrillo, L., (2004). Energía de Biomasa. San Salvador de Jujuy, Argentina.Edición del autor.
- 8 Cendales Ladino, E.D., (2011). Producción de biogás mediante la codigestión anaeróbica de la mezcla de residuos cítricos y estiércol bovino para su utilización como fuente de energía renovable. Tesis de maestría, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, D.C., Colombia.
- 9 CONAGUA, (2012). Inventario nacional de plantas municipales de potabilización y de tratamiento de aguas residuales en operación, México.
- 10 Deublein, D.D. y Steinhauser, A.S., 2008, Biogas from Waste and Renewable Resources, An Introduction, Alemania, Wiley-VCH Verlag GmbH y Co. kGaA.

- 11 Dong, L., Zhenhong, Y., & Yongming, S. (2010). Semi-dry mesophilic anaerobic digestion of water sorted organic fraction of municipal solid waste (WS-OFMSW). Bioresource Technology, 101(8): 2722–2728.
- 12 Donoso-Bravo, A., Mailier, J., Martin, C., Rodríguez, J., Aceves-Lara, C. A., & Wouwer, A. Vande. (2011). Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. Water Research, 45(17), 5347–5364.
- 13 Dublein, D.D. & Steinhauser, A.S., (2008). Biogas from waste and renewable resources, an introduction. Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH y Co. kGaA.
- 14 Fdez.Güelfo, L., Álvarez-Gallego, C., Sales, M. D. y Romero, G. L., (2011). Dry-Thermophilic anaerobic digestion of simulated organic fraction of municipal solid waste: Process modeling. Bioresourse Technology 102: 606-611.
- 15 Fernández, R.J., (2010). Optimización de la digestion anaerobia seca de la Fracción Orgánica de los Residuos Sólidos Urbanos (FORSU) en reactores en fases de temperatura. Tesis doctoral, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, España.
- 16 Forster, C.T. (2005). Digestión anaerobia termofílica seca de Residuos Sólidos Urbanos: Estudio de las variables del proceso en el arranque y estabilización del bio-reactor. Tesis doctoral, Facultad de Ciencias, Universidad de Cádiz, España.
- 17 Gerardi, M.H., (2003). The Microbiology of Anaerobic Digesters. Hoboken, New Jersey: Wiley-Interscience.
- 18 Herbert, H.P. (2010). Environmental anaerobic technology: applications and new developments. London: Imperial College Press.
- 19 Khalid, A., Arshad, M., Anjum, M., Mahmood, T., & Dawson, L. (2011). The anaerobic digestion of solid organic waste. Waste Management, 31(8), 1737– 1744.
- 20 Kossman, W., Pönitz, U., Habermehl, S., Hoerz, T., Krämer, P., Klingler, B., Kellner, C., Wittur, T., Klopotek, F.V., Krieg, A. & Euler, H., (1997). Biogas Digest: Biogas Aplication and product development (Volume II). Germany:



- 21 Lai, T. E., Koppar, A. K., Pullammanappallil, P. C., & Clarke, W. P. (2009). Mathematical Modeling of Batch, Single Stage, Leach Bed Anaerobic Digestion of Organic Fraction of Municipal Solid Waste. Energy Systems -Optimization in the Energy Industry, 233–275.
- 22 Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR), Diario Oficial de la Federación, (2003). Última reforma publicada DOF 30-05-2012, México, D.F.
- 23 Mata_Alvarez, J., (2003). Anaerobic digestion of the organic fraction of municipal solid waste: a perspective. En Mata.Alvarez J. (ed.), Biomethanization of organic fraction of municipal solid wastes. IWA Publishing Company.
- 24 Monroy, O., Famá, G., Meraz, M., Montoya, L. & Macarie H. (1998). Digestión anaerobia en México, estado de la tecnología. Ingeniería y ciencias ambientales Num. 39.
- 25 Montes, C.M.E., (2008). Estudio Técnico-Económico de la Digestión Anaerobia conjunta de la Fracción Oránica de los Residuos Sólidos Urbanos y Lodos de Depuradora para la obtención de Biogás. Tesis doctoral, Departamento de Ingeniería Civil: Ordenación del Territorio, Urbanismo y Medio Ambiente, Universidad Politécnica de Madrid. Madrid, España.
- 26 Neves, L., Oliveira, R. & Alves, M.M., (2009). Co-digestion of cow manure, food waste and intermittent input of fat. Bioresource Technology 100: 1957-1962.
- 27 Norma Mexicana NMX-AA-61-1985, (1992). Protección al Ambiente –
 Contaminación del suelo Residuos Sólidos Municipales Determinación de la Generación, Diario Oficial de la Federación, México.
- 28 Ostrem, K. (2004). Greening Waste: Anaerobic Digestion for Treating the Organic Fraction of Municipal Solid Wastes. Tesis de Maestría, Department of Earth and Enviromental Engineering, Columbia University, Columbia University, EUA.

- 29 Pavlostathis, S. & Giraldo-Gómez, E. (1991). Kinetics of anaerobic treatment. Water Science Technology 24, 35-59.
- 30 Poggio, D. (2007). Diseño y construcción de dos digestores anaeróbicos en el altiplano andino peruano. Tesis de maestría, Universidad Politécnica de Catalunya.
- 31 Rivera, S.G., (2005). Diagnóstico de la problemática de los residuos sólidos urbanos en el municipio de Ciudad Ixtepec, Oaxaca. Tesis profesional, Universidad del Mar, Puerto Ángel. Oaxaca, México.
- 32 Rivera-Salvador, V., Aranda-Barradas, J. S., Espinosa-Solares, T., Robles-Martínez, F., & Toledo, J. U. (2015). The Anaerobic Digestion Model IWA-ADM1: a Review of Its Evolution. Ingeniería Agrícola Y Biosistemas, 1(2), 109–117.
- 33 Rosen, C. & Jeppsson, U. (2006). Aspects on ADM1 implementation within the BSM2 framework, Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University.
- 34 Schnüer, A. & Jarvis, A. (2010). Microbiological Handbook for Biogas Plants, Malmö: Svenskt Gastekniskt Centre AB.
- 35 Schnürer, A. & Jarvis, A., (2010). Microbiological Handbook for Biogas Plants.Malmö, Sweden: Svenskt Gastekniskt Centre AB.
- 36 SEMARNAT, (2012). Informe de la Situación del Medio Ambiente en México. Compendio de Estadísticas Ambientales. Indicadores Clave y de Desempeño Ambiental, México.
- Smith, J.M. (1991). Ingeniería de la Cinética Química, 6ª ed. México: McGraw
 Hill.
- 38 Tchobanoglous, G., Theisen, H. & Vigil, S. (1993). Integrated solid waste management: Engineering, principles and management issues, Nueva York: McGraw-Hill.
- 39 Varnero, M.M.T. (2011). Manual de Biogás. Proyecto CHI/00/G32, Remoción de Barreras para la electrificación rural con energías renovables. Santiago de Chile.

40 Wellinger, A. (2005). Biogas Production and Utilization. International Energy Agency (IEA). Bioenergy, Suiza.

41 Zill, Dennis G. (2006). Ecuaciones Diferenciales con Aplicaciones de Modelado.México: Brooks/Cole Publishing, 6^a Ed.



 \bigcirc

 \bigcirc

Anexo I. Matrices de ecuaciones en el modelo ADM1, (Batstone, 2002).

Tabla A3. Coeficientes bioquímicos de rapidez (v_{i,j}) y ecuaciones de rapidez cinética (p_j) para componentes solubles.

	Component → <i>i</i>	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Rate (p _j , kg COD.m ⁻³ .d ⁻¹)
1	Process↓	S _{su}	S _{aa}	S _{fa}	S _{va}	S _{bu}	Spro	S _{ac}	S _{h2}	S _{ch4}	S _{IC}	S _{IN}	s _l	
1 2 3 4	Disintegration Hydrolysis carbohydrates Hydrolysis of proteins Hydrolysis of lipids	1 1-f _{fa,li}	1	f _{fa,li}									f _{sl,xc}	k _{dis} X _c k _{hyd,ch} X _{ch} k _{hyd,p} X _{pr} k _{hyd,l} X _{li}
5	Uptake of sugars	-1				$(1-Y_{su})f_{bu,su}$	(1-Y _{su})f _{pro,su}	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$	$(1-Y_{su})f_{h2,su}$		$-\sum_{i=0,11,24}C_i v_{i,5}$	-(Y _{su}) N _{bac}		$k_{m,su} \frac{s_{su}}{K_{su} + S} X_{su} I_1$
6	Uptake of amino acids		-1		(1-Y _{aa})f _{va,aa}	$(1-Y_{aa})f_{bu,aa}$	(1-Y _{aa})f _{pro,aa}	$(1-Y_{aa})f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{h2,aa}$		$-\sum_{i=1-9,11-24}^{i=9,11-24}C_iv_{i,6}$	$N_{\rm aa}$ – $(Y_{\rm aa}) N_{\rm bac}$		$k_{m,aa} \frac{s_{aa}}{K_{s} + S_{ca}} X_{aa} I_{1}$
7	Uptake of LCFA			-1				(1-Y _{fa}) 0.7	(1-Y _{fa}) 0.3			–(Y _{fa}) N _{bac}		$k_{m,fa} \frac{s_{fa}}{K_s + S_{fa}} X_{fa} I_2$
8	Uptake of valerate				-1		(1-Y _{c4}) 0.54	(1-Y _{c4}) 0.31	(1-Y _{c4}) 0.15			$-(Y_{c4}) N_{bac}$		$k_{m,c4} \frac{s_{va}}{K_{\rm S} + S_{va}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{\rm bu} / S_{va}}$
9	Uptake of butyrate					-1		(1-Y _{c4}) 0.8	(1-Y _{c4}) 0.2			$-(Y_{c4}) N_{bac}$		$k_{m,c4} \frac{s_{bu}}{K_{\rm S} + S_{\rm bu}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{va} / S_{\rm bu}}$
10	Uptake of propionate						-1	(1-Y _{pro}) 0.57	(1-Y _{pro}) 0.43		$-\sum_{i=1-9,11-24}C_iv_{i,10}$	-($Y_{\rm pro}$) $N_{\rm bac}$		$k_{m,pr} \frac{s_{pro}}{K_{S} + S_{pro}} X_{pro} I_2$
11	Uptake of acetate							-1		(1- <i>Y</i> _{ac})	$-\sum_{i=1-9,11-24}C_iv_{i,11}$	-($Y_{\rm ac}$) $N_{\rm bac}$		$k_{m,ac} \frac{s_{ac}}{K_{S} + S_{ac}} X_{ac} I_{3}$
12	Uptake of hydrogen								-1	(1- <i>Y</i> _{h2})	$-\sum_{i=1-9,11-24}^{i} C_i v_{i,12}$	$-(\gamma_{h2}) N_{bac}$		$k_{m,h2} \frac{s_{h2}}{K_{S} + S_{h2}} X_{h2} I_{1}$
13 14 15 16 17 18 19	Decay of X_{su} Decay of X_{aa} Decay of X_{fa} Decay of X_{c4} Decay of X_{pro} Decay of X_{ac} Decay of X_{h2}													k _{dec,Xsu} X _{su} k _{dec,Xaa} X _{aa} k _{dec,Xfa} X _{fa} k _{dec,Xc4} X _{c4} k _{dec,Xpro} X _{pro} k _{dec,Xac} X _{ac} k _{dec,Xh2} X _{h2}
		Monosaccharides (kgCOD·m ^{−3})	Amino acids (kgCOD·m ⁻³)	Long chain fatty acids (kgCOD·m ⁻³)	Total valerate (kgCOD·m ^{−3})	Total butyrate (kgCOD·m ^{−3})	Total propionate (kgCOD·m ⁻³)	Total acetate (kgCOD·m ⁻³)	Hydrogen gas (kgCOD·m⁻³)	Methane gas (kgCOD·m⁻³)	Inorganic carbon (kmoleC·m ^{−3})	Inorganic nitrogen (kmoleN·m ⁻³)	Soluble inerts (kgCOD·m ⁻³)	Inhibition factors: / ₁ = / _{pH} / _{N, lim} , / _{h2} / ₂ = / _{pH} / _{N, lim} , / _{h2} / ₃ = / _{pH} / _{N, lim} , / _{N3,Xac}

			-		-									
j	Component → Í Process↓	13 <i>X</i> c	14 X _{ch}	15 X _{pr}	16 <i>X</i> li	17 X _{su}	18 X _{aa}	19 X _{fa}	20 X _{c4}	21 X _{pro}	22 X _{ac}	23 X _{h2}	24 X ₁	Rate (ρ _j , kg COD.m ⁻³ .d ⁻¹)
1 2 3 4	Disintegration Hydrolysis carbohydrates Hydrolysis of proteins Hydrolysis of lipids	-1	f _{ch,xc} -1	f _{pr,xc} -1	f _{li,xc} -1								f _{xl,xc}	k _{dis} X _c k _{hyd,ch} X _{ch} k _{hyd,pr} X _{pr} k _{hyd,li} X _{li}
5	Uptake of sugars					Y _{su}								$k_{m,su} \frac{s_{su}}{K_s + S} X_{su} I_1$
6	Uptake of amino acids						Y _{aa}							$k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} X_{aa} I_1$
7	Uptake of LCFA							Y _{fa}						$k_{m,fa} \frac{s_{fa}}{K_S + S_{fa}} X_{fa} I_2$
8	Uptake of valerate								Y _{c4}					$k_{m,c4} \frac{S_{va}}{K_{S} + S_{va}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{bu} / S_{va}} I$
9	Uptake of butyrate								Y _{c4}					$k_{m,c4} \frac{s_{bu}}{K_{\rm S} + S_{\rm bu}} X_{c4} \frac{1}{1 + S_{\rm va} / S_{\rm bu}} I$
10	Uptake of propionate									Y _{pro}				$k_{mpr} \frac{s_{pro}}{K_{\rm S} + S_{pro}} X_{pro} I_2$
11	Uptake of acetate										Y _{ac}			$k_{\rm m,ac} \frac{s_{\rm ac}}{K_{\rm S} + S_{\rm ac}} X_{\rm ac} I_{\rm 3}$
12	Uptake of hydrogen											Y _{h2}		$k_{m,h2} \frac{s_{h2}}{K_{S} + S_{h2}} X_{h2} I_{1}$
13 14 15 16 17 18 19	Decay of X_{su} Decay of X_{aa} Decay of X_{fa} Decay of X_{c4} Decay of X_{pro} Decay of X_{ac} Decay of X_{h2}	1 1 1 1 1 1				-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		k _{dec,Xsu} X _{su} k _{dec,Xaa} X _{aa} k _{dec,Xfa} X _{fa} k _{dec,Xc4} X _{c4} k _{dec,Xpro} X _{pro} k _{dec,Xac} X _{ac} k _{dec,Xh2} X _{h2}
		Composites (kgCOD·m ⁻³)	Carbohydrates (kgCOD·m ⁻³)	Proteins (kgCOD·m ⁻³)	Lipids (kgCOD·m ⁻³)	Sugar degraders (kgCOD·m ⁻³)	Amino acid degraders (kgCOD·m ⁻³)	LCFA degraders (kgCOD·m ⁻³)	Valerate and butyrate degraders (kgCOD·m ⁻³)	Propionate degraders (kgCOD ·m ⁻³)	Acetate degraders (kgCOD·m⁻³)	Hydrogen degraders (kgCOD·m ⁻³)	Particulate inerts (kgCOD·m ⁻³)	Inhibition factors: $l_1 = l_{pH} l_{(N,lim)}$ $l_2 = l_{pH} l_{(N,lim)} l_{h2}$ $l_3 = l_{pH} l_{(N,lim)} \cdot l_{NH3, Xac}$

Tabla A4. Coeficientes bioquímicos de rapidez (v_{i,j}) y ecuaciones de rapidez cinética (ρ_j) para componentes particulados.



Anexo II. Nomenclatura y ecuaciones utilizadas en el modelo ADM1.

Medida	Unidades
Concentración	$\frac{kgDQO}{m^3}$
Concentración (no DQO/COD)	$\frac{kmol}{m^3}$
Presión	bar
Temperatura	K
Distancia	т
Volumen	m^3
Energía	J (kJ)

Unidades utilizadas.

Nomenclatura y descripción de parámetros y variables.

• Coeficientes estequiométricos.

Símbolo	Descripción	Unidades
Ci	Contenido de carbono del componente i	kmolC kgDQO
Ni	Contenido de nitrógeno del componente i	kmolN kgDQO
$oldsymbol{ u}_{i,j}$	Coeficiente de velocidad para el componente i en el proceso j	$\frac{kgDQO}{m^3}$
$f_{producto,sustrato}$	Rendimiento del producto sobre el sustrato (solo catabolismo)	kgDQO kgDQO

• Constantes y coeficientes de equilibrio.

Símbolo	Descripción	Unidades
K _{a,acido}	Coeficiente de equilibrio ácido-base	$M\left(\frac{kmol}{m^3}\right)$



Símbolo	Descripción	Unidades
K _H	Coeficiente de ley de Henry	$\frac{M}{bar}\left(\frac{kmol}{m^3 bar}\right)$
<i>pK</i> _a	$-log_{10}[K_a]$	
R	Constante de ley de los gases $(8.314x10^{-2})$	$\frac{bar}{M K} \left(\frac{bar m^3}{kmol K} \right)$
ΔG	Energía libre	$\frac{J}{mol}$

• Parámetros y razones cinéticas.

Símbolo	Descripción	Unidades
k _{A/Bi}	Parámetro cinético ácido-base	$\frac{1}{M d}$
k _{dec}	Rapidez de decaimiento de primer orden	$\frac{1}{d}$
I _{inhibidor,proceso}	Función de inhibición (ver K_I)	
knnogogo	Parámetro de primer orden	1
proceso	(normalmente para hidrólisis)	d
$k_L a$	Coeficiente de transferencia gas-líquido	$\frac{1}{d}$
$K_{I,inhibicion,proceso}$	50% de concentración inhibidora	$\frac{kgDQO}{m^3}$
<i>k</i>	Tasa de absorción específica máxima	kgDQO_S
••m,proceso	de Monod (μ_{max}/Y)	kgDQO_X d
K _{S,proceso}	Valor de saturación media	$\frac{kgDQO_S}{m^3}$
$ ho_j$	Rapidez cinética de proceso j	$\frac{kgDQO_S}{m^3 d}$
Y _{sustrato}	Rendimiento de biomasa en sustrato	kgDQO_X kgDQO_S
μ_{max}	Tasa de crecimiento específica máxima	1
• mux	de Monod	d
• Variables de estado dinámico y algebraicas.

Símbolo	Descripción	Unidades
рН	$-log_{10}[H^+]$	Adimensional
$p_{gas,i}$	Presión del gas i	bar
P _{gas}	Presión de gas total	bar
Si	Componente soluble i	$\frac{kgDQO}{m^3}$
t _{res,X}	Retención extendida de sólidos	d
Т	Temperatura	K
V	Volumen	m^3
X _i	Componente particulado i	$\frac{kgDQO}{m^3}$

Expresiones de rapidez para los diferentes procesos llevados a cabo.

ρ	Proceso	$Rapidez\left[\frac{kgCOD}{d}\right]$
1	Desintegración	k _{dis} X _c
2	Hidrólisis de carbohidratos	$k_{hyd,ch}X_{ch}$
3	Hidrólisis de proteínas	$k_{hyd,pr}X_{pr}$
4	Hidrólisis de lípidos	$k_{hyd,li}X_{li}$
5	Consumo de azúcares	$k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_{s,su} + S_{su}} X_{su} I_{pH,aa} I_{IN,lim}$
6	Consumo de aminoácidos	$k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_{s,aa} + S_{aa}} X_{aa} I_{pH,aa} I_{IN,lim}$
7	Consumo de LCFA	$k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{K_{s,fa} + S_{fa}} X_{fa} I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{H_2,fa}$
8	Consumo de valerato	$k_{m,C_{4}} \frac{S_{va}}{K_{s,va} + S_{va}} X_{C_{4}} \frac{1}{1 + S_{bu}/S_{va}} I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{H_{2},C4}$
9	Consumo de butirato	$k_{m,C_4} \frac{S_{bu}}{K_{s,bu} + S_{bu}} X_{C_4} \frac{1}{1 + S_{va}/S_{bu}} I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{H_2,C4}$
10	Consumo de propionato	$k_{m,pro} \frac{S_{pro}}{K_{s,pro} + S_{pro}} X_{pro} I_{pH,aa} I_{IN,lim} I_{H_2,pro}$

ρ	Proceso	Rapidez $\left[\frac{kgCOD}{d}\right]$
11	Consumo de acetato	$k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_{s,ac} + S_{ac}} X_{ac} I_{pH,ac} I_{IN,lim} I_{NH_3,X_{ac}}$
12	Consumo de hidrogeno	$k_{m,H_2} \frac{S_{H_2}}{K_{s,H_2} + S_{H_2}} X_{H_2} I_{pH,h_2} I_{IN,lim}$
13	Decaimiento de X _{su}	$k_{dec,X_{su}}X_{su}$
14	Decaimiento de X _{aa}	$k_{dec,X_{aa}}X_{aa}$
15	Decaimiento de X _{fa}	$k_{dec,X_{fa}}X_{fa}$
16	Decaimiento de X _{C4}	$k_{dec,X_{C_4}}X_{C_4}$
17	Decaimiento de X _{pro}	$k_{dec,X_{pro}}X_{pro}$
18	Decaimiento de X _{ac}	$k_{dec,X_{ac}}X_{ac}$
19	Decaimiento de X _{H2}	$k_{dec,X_{H_2}}X_{H_2}$

Funciones de inhibición.

Descripción	Ecuación	Usada para
No competitiva	$I = \frac{1}{1 + S_I / K_I}$	Inhibición por hidrogeno y por amonio libre
	$I_{pH,i} = \begin{cases} \exp\left(-3\left(\frac{pH - pH_{ul,i}}{pH_{ul,i} - pH_{ll,i}}\right)^2\right) : pH < pH_{ul,i} \\ 1 : pH > pH_{ul,i} \end{cases}$	Inhibición debida al pH
Consumo competitivo	$I = \frac{1}{1 + S_I / S}$	Competencia de butirato y valerato por <i>X</i> _{c4}
Sustrato secundario	$I = \frac{1}{1 + K_I / S_I}$	Todos los consumos, para inhibir consumo cuando <i>S_{IN}</i> ~0



Ecuaciones de concentración para componentes solubles.

ĵDO j

	Componente	Ecuación
8	Hidrogeno gas [<u>kgCOD</u> <u>m³</u>]	$\begin{aligned} \frac{dS_{h2}}{dt} &= (1 - Y_{su})f_{h2,su}\rho_5 I_{pH}I_{IN,lim} + (1 - Y_{aa})f_{h2,aa}\rho_6 I_{pH}I_{IN,lim} \\ &+ (1 - Y_{fa})0.3\rho_7 I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2} \\ &+ (1 - Y_{C_4})0.15\rho_8 I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2} \\ &+ (1 - Y_{C_4})0.2\rho_9 I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2} \\ &+ (1 - Y_{pro})0.43\rho_{10}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2} - \rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim} \end{aligned}$
9	Metano gas $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dS_{ch4}}{dt} = (1 - Y_{ac})\rho_{11}I_{pH}I_{IN,lim}I_{NH_3,X_{ac}} + (1 - Y_{H_2})\rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim}$

$ \begin{array}{rcl} $		Componente	Ecuación
$+ [-C_{pro} + (1 - Y_{pro})0.57C_{ac} + Y_{pro}C_{bac}]\rho_{10}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{2}} + [-C_{ac} + (1 - Y_{ac})C_{CH_{4}} + Y_{ac}C_{biom}]\rho_{11}I_{pH}I_{IN,lim}I_{NH3,Xac} + [(1 - Y_{H_{2}})C_{CH_{4}} + Y_{H_{2}}C_{bac}]\rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim}$	10	Componente Carbono Inorgánico $\left[\frac{kmol C}{m^3}\right]$	$\begin{split} \label{eq:starter} \begin{split} & \frac{dS_{IC}}{dt} = -\{[-C_{xc} + f_{Sl,xc}C_{Sl} + f_{Cl,xc}C_{CH} + f_{pr,xc}C_{pr} + f_{li,xc}C_{li} \\ & + f_{Xl,xc}C_{Xl}]\rho_1 + [-C_{CH} + C_{su}]\rho_2 + [-C_{pr} + C_{aa}]\rho_3 \\ & + [-C_{li} + (1 - f_{fa,li})C_{su} + f_{fa,li}C_{fa}]\rho_4 \\ & + [-C_{su} \\ & + (1 - Y_{su})(f_{bu,su}C_{bu} + f_{pro,su}C_{pro} + f_{ac,su}C_{ac}) \\ & + Y_{su}C_{biom}]\rho_5I_{pH}I_{IN,lim} \\ & + [-C_{aa} \\ & + (1 - Y_{aa})(f_{va,aa}C_{va} + f_{bu,aa}C_{bu} + f_{pro,aa}C_{pro} \\ & + f_{ac,aa}C_{ac}) + Y_{aa}C_{biom}]\rho_6I_{pH}I_{IN,lim} \\ & + [-C_{fa} + (1 - Y_{fa})0.7C_{ac} \\ & + Y_{fa}C_{bac}]\rho_7I_{pH,aa}I_{IN,lim}I_{H_2,fa} \\ & + [-C_{va} + (1 - Y_{c4})(0.54C_{pro} + 0.31C_{ac}) \\ & + Y_{c4}C_{bac}]\rho_9I_{pH,aa}I_{IN,lim}I_{H_2,c4} \\ & + [-C_{pro} + (1 - Y_{c4})0.8C_{ac} \\ & + Y_{c4}C_{bac}]\rho_{10}I_{pH}I_{N,lim}I_{H_2,c4} \\ & + [-C_{pro} + (1 - Y_{pro})0.57C_{ac} \\ & + Y_{pro}C_{bac}]\rho_{10}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2,c4} \\ & + [-C_{ac} + (1 - Y_{ac})C_{CH_4} \\ & + Y_{ac}C_{biom}]\rho_{11}I_{pH}I_{IN,lim}I_{NH3,Xac} \\ & + [(1 - Y_{h_2})C_{CH} + Y_{H_2}C_{bac}]\rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim} \\ \end{split}$

	Componente	Ecuación
11	Nitrógeno inorgánico [<u>kmol N</u>]	$\begin{aligned} \frac{dS_{IN}}{dt} &= -(Y_{su})N_{bac}\rho_{5}I_{pH}I_{IN,lim} + (N_{aa} - (Y_{aa})N_{bac})\rho_{6}I_{pH}I_{IN,lim} \\ &- (Y_{fa})N_{bac}\rho_{7}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{2}} \\ &- (Y_{C_{4}})N_{bac}\rho_{8}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{2}} \\ &- (Y_{C_{4}})N_{bac}\rho_{9}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{2}} \\ &- (Y_{pro})N_{bac}\rho_{10}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{2}} \\ &- (Y_{ac})N_{bac}\rho_{11}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_{3},X_{ac}} \\ &- (Y_{H_{2}})N_{bac}\rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim} + (N_{bac} - N_{xc})(\rho_{13} + \rho_{14} \\ &+ \rho_{15} + \rho_{16} + \rho_{17} + \rho_{18} + \rho_{19}) + (N_{xc} - f_{xi,xc}N_{I} \\ &- f_{si,xc}N_{I} - f_{pr,xc}N_{aa})k_{dis}X_{c} \end{aligned}$
12	Inertes solubles $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dS_I}{dt} = f_{SI,X_C}\rho_1$

Ecuaciones para componentes particulados.

	Componente	Ecuación
13	Compuestos $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_c}{dt} = -\rho_1 + \rho_{13} + \rho_{14} + \rho_{15} + \rho_{16} + \rho_{17} + \rho_{18} + \rho_{19}$
14	Carbohidratos $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{ch}}{dt} = f_{ch,xc}\rho_1 - \rho_2$
15	Proteínas $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{pr}}{dt} = f_{pr,xc}\rho_1 - \rho_3$
16	Lípidos	$\frac{dX_{li}}{dX_{li}} = f_{li} = 0$
10	$\left[\frac{\kappa g COD}{m^3}\right]$	$dt = f_{li,xc}\rho_1 - \rho_4$
17	Degradadores de	dX_{su}
17	azúcar $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dt}{dt} = Y_{su}\rho_5 I_{pH}I_{IN,lim} - \rho_{13}$

	Componente	Ecuación
18	Degradadores de aminoácidos $\left[\frac{kgCOD}{m^3} ight]$	$\frac{dX_{aa}}{dt} = Y_{aa}\rho_6 I_{pH} I_{IN,lim} - \rho_{14}$
19	Degradadores de (LCFA) $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{fa}}{dt} = Y_{fa}\rho_7 I_{pH} I_{IN,lim} I_{H_2} - \rho_{15}$
20	Valerato y butirato $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{C_4}}{dt} = Y_{C_4}\rho_8 I_{pH} I_{IN,lim} I_{H_2} + Y_{C_4}\rho_9 I_{pH} I_{IN,lim} I_{H_2} - \rho_{16}$
21	Degradadores de propionato $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{pro}}{dt} = Y_{pro}\rho_{10}I_{pH}I_{IN,lim}I_{H_2} - \rho_{17}$
22	Degradadores de acetato $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{ac}}{dt} = Y_{ac}\rho_{11}I_{pH}I_{IN,lim}I_{NH_3,X_{ac}} - \rho_{18}$
23	Degradadores de hidrogeno $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_{H_2}}{dt} = Y_{H_2}\rho_{12}I_{pH}I_{IN,lim} - \rho_{19}$
24	Inertes particulados $\left[\frac{kgCOD}{m^3}\right]$	$\frac{dX_I}{dt} = f_{xI,xc}\rho_1$

Ecuaciones algebraicas de equilibrio ácido-base.

	Componente	Ecuación
1	Suma de iones	$S_{H^{+}} = -S_{NH_{4}^{+}} + S_{HCO_{3}^{-}} + \frac{S_{ac^{-}}}{64} + \frac{S_{pro^{-}}}{112} + \frac{S_{bu^{-}}}{160} + \frac{S_{va^{-}}}{208} + \frac{K_{W}}{S_{H^{+}}}$
		$+ 3_{an} + 3_{cat} +$
2	Ion amonio	$S_{NH_4^+} = \frac{S_{H^+}S_{IN}}{K_{a,NH_4^+} + S_{H^+}}$
3	Ion bicarbonato	$S_{HCO_{3}^{-}} = \frac{K_{a,CO_{2}}S_{IC}}{K_{a,CO_{2}} + S_{H^{+}}}$

	Componente	Ecuación
4	lon acetato	$S_{ac^-} = \frac{K_{a,ac}S_{ac}}{K_{a,ac} + S_{H^+}}$
5	lon propionato	$S_{pro^-} = \frac{K_{a,pro}S_{pro}}{K_{a,pro} + S_{H^+}}$
6	lon butirato	$S_{bu^-} = \frac{K_{a,bu}S_{bu}}{K_{a,bu} + S_{H^+}}$
7	lon valerato	$S_{\nu a^-} = \frac{K_{a,\nu a} S_{\nu a}}{K_{a,\nu a} + S_{H^+}}$
8	Hidróxido	$S_{OH^-} = \frac{K_W}{S_{H^+}}$
9	Dióxido de carbono	$S_{CO_2} = S_{IC} - S_{HCO_3^-}$
10	Amoniaco	$S_{NH_3} = S_{IN} - S_{NH_4^+}$

Razones cinéticas para la transferencia de masa en la interfaz gaseosa.

	Componente	Ecuación
1	Hidrógeno	$\rho_{T,H_2} = k_L a (S_{liq,H_2} - 16K_{H,H_2}P_{gas,H_2})$
2	Metano	$\rho_{T,CH_4} = k_L \alpha (S_{liq,CH_4} - 64K_{H,CH_4}P_{gas,CH_4})$
3	Dióxido de carbono	$\rho_{T,CO_2} = k_L a(S_{liq,CO_2} - 16K_{H,CO_2}P_{gas,CO_2})$

Ecuaciones para la transferencia de masa en la interfaz líquido-gas.

	Componente	Ecuación
1	Flujo de gas	$Q_{gas} = \frac{RT_{op}}{P_{gas} - P_{gas,H_2O}} V_{liq} \left(\frac{\rho_{T,H_2}}{16} + \frac{\rho_{T,CH_4}}{64} + \rho_{T,CO_2}\right)$
2	Presión parcial de Hidrógeno gas	$P_{gas,H_2} = \frac{RT_{op}}{16} S_{gas,H_2}$
3	Presión parcial de Metano gas	$P_{gas,CH_4} = \frac{RT_{op}}{64} S_{gas,CH_4}$

	Componente	Ecuación			
Λ	Presión parcial de CO ₂	p - pT S			
4	gas	$r_{gas,CO_2} = \kappa I_{op} S_{gas,CO_2}$			

Ecuaciones de transferencia de masa, interfaz líquido-gas.

	Componente	Ecuación
1	Hidrógeno	$\frac{dS_{gas,H_2}}{dt} = -\frac{S_{gas,H_2}Q_{gas}}{V_{gas}} + \frac{V_{liq}}{V_{gas}}k_La(S_{liq,H_2} - 16K_{H,H_2}P_{gas,H_2})$
2	Metano	$\frac{dS_{gas,CH_4}}{dt} = -\frac{S_{gas,CH_4}Q_{gas}}{V_{gas}} + \frac{V_{liq}}{V_{gas}}k_La(S_{liq,CH_4} - 64K_{H,CH_4}P_{gas,CH_4})$
3	Dióxido de carbono	$\frac{dS_{gas,CO_2}}{dt} = -\frac{S_{gas,CO_2}Q_{gas}}{V_{gas}} + \frac{V_{liq}}{V_{gas}}k_La(S_{liq,CO_2} - 16K_{H,CO_2}P_{gas,CO_2})$

Anexo III. Valores de las constantes utilizadas.

Descripción	Nomenclatura	Unidades	Valor
Ácidos grasos de lípidos	$m{f}_{fa,li}$	Adim.	0.95
Hidrógeno de azúcares	$f_{\sf h2,su}$	Adim.	0.19
Butirato de azúcares	$f_{ m bu,su}$	Adim.	0.13
Propionato de azúcares	$f_{\sf pro,su}$	Adim.	0.27
Acetato de azúcares	$f_{\sf ac,su}$	Adim.	0.41
Hidrógeno de aminoácidos	$f_{\sf h2,aa}$	Adim.	0.06
Valerato de aminoácidos	$f_{ m va,aa}$	Adim.	0.23
Butirato de aminoácidos	$f_{ m bu,aa}$	Adim.	0.26
Propionato de aminoácidos	$f_{ m pro,aa}$	Adim.	0.05
Acetato de aminoácidos	fac,aa	Adim.	0.4
Contenido de nitrógeno en biomasa	N _{bac}	kmol kgDQO	0.00625
Contenido de nitrógeno de materiales compuestos*	N _{xc}	kmolN kgDQO	0.002685714
Contenido de nitrógeno de materiales inertes*	Nı	kmolN kgDQO	0.004285714
Nitrógeno en aminoácidos y proteínas*	N _{aa}	kmolN kgDQO	0.007
Contenido de carbono en compuestos particulados*	C _{xc}	kmol kgDQO	0.02786
Contenido de carbono en solubles inertes*	C _{si}	kmol kgDQO	0.03
Contenido de carbono en carbohidratos	C _{ch}	kmol kgDQO	0.0313
Contenido de carbono en proteínas*	C _{pr}	kmol kgDQO	0.03
Contenido de carbono en lípidos	C _{li}	kmol kgDQO	0.022

Valores de parámetros estequiométricos.

(W)

Descripción	Nomenclatura	Unidades	Valor
Contenido de carbono en inertes particulados*	C _{xi}	kmol kgDQO	0.03
Contenido de carbono en ácidos grasos	C _{fa}	kmol kgDQO	0.0217
Contenido de carbono en valerato	C _{va}	kmol kgDQO	0.024
Contenido de carbono en monosacáridos	C _{su}	kmol kgDQO	0.0313
Contenido de carbono en aminoácidos*	C _{aa}	kmol kgDQO	0.03
Contenido de carbono en butirato	C _{bu}	kmol kgDQO	0.025
Contenido de carbono en acetato	C _{ac}	kmol kgDQO	0.0313
Contenido de carbono en metano	Ссн4	kmol kgDQO	0.0156
Contenido de carbono en propionato	C _{pro}	kmol kgDQO	0.0268
Contenido de carbono en biomasa	C_{bac}	kmolC kgDQO	0.0313
Rendimiento de biomasa en monosacáridos	Y_{su}	COD COD	0.1
Rendimiento de biomasa en aminoácidos	Y _{aa}	COD COD	0.08
Rendimiento de biomasa en ácidos grasos	Y_{fa}	COD COD	0.06
Rendimiento de biomasa en valerato y butirato	Y _{c4+}	COD COD	0.06
Rendimiento de biomasa en propionato	Y _{pro}	COD COD	0.04
Rendimiento de biomasa en acetato	Y _{ac}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.05
Rendimiento de biomasa en hidrógeno	Y _{h2}	COD COD	0.06

Descripción	Nomenclatura	Unidades	Valor
Constante de desintegración	k _{dis}	$\frac{1}{d}$	0.5
Constante de hidrólisis de carbohidratos	$k_{hyd,CH}$	$\frac{1}{d}$	10
Constante de hidrólisis de proteínas	$k_{hyd,PR}$	$\frac{1}{d}$	10
Constante de hidrólisis de lípidos	${\sf k}_{\sf hyd, \sf LI}$	$\frac{1}{d}$	10
Constante de decaimiento	k _{dec,all}	$\frac{1}{d}$	0.02
Constante de consumo de azucares	k _{m,su}	COD COD d	30
Constante de consumo de aminoácidos	k _{m,aa}	COD COD d	50
Constante de consumo de LCFA	k _{m,fa}	COD COD d	6
Constante de consumo de valerato y butirato	k _{m,c4+}	COD COD d	20
Constante de consumo de propionato	k _{m,pro}	COD COD d	13
Constante de consumo de acetato	k _{m,ac}	COD COD d	8
Constante de consumo de hidrógeno	$\mathbf{k}_{m,h2}$	COD COD d	25
Valor de saturación media de amoniaco	$K_{S,NH3,all}$	М	0.0001
Valor de saturación media de azúcares	$K_{S,su}$	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.5
Valor de saturación media de aminoácidos	$K_{S,aa}$	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.3
Valor de saturación media de LCFA	$K_{S,fa}$	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.4
Valor de saturación media de valerato y butirato	K _{S,c4+}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.2
Valor de saturación media de propionato	K _{S,pro}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.1

Descripción	Nomenclatura	Unidades	Valor	
Valor de saturación media de acetato	K _{S,ac}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.15	
Valor de saturación media de hidrógeno	$K_{S,h2}$	$\frac{kgDQO}{m^3}$	7.00E-02	
Valor de saturación media de nitrógeno inorgánico	K _{s,IN}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.0001	
Concentración inhibidora de hidrógeno a través de LCFA	$K_{\rm I,H2,fa}$	$\frac{kgDQO}{m^3}$	5.00E-06	
Concentración inhibidora de hidrógeno a través de valerato y butirato	K _{I,H2,c4+}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	1.00E-05	
Concentración inhibidora de hidrógeno a través de propionato	K _{I,H2,pro}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	3.50E-06	
Concentración inhibidora de amoniaco	K _{I,NH3}	М	0.0018	
Inhibición debida a la limitación de Nitrógeno	K _{I,IN}	$\frac{kgDQO}{m^3}$	0.0001	
Límite superior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{UL,ac}$	U. de pH	7	
Límite inferior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{LL,ac}$	U. de pH	6	
Límite superior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{UL,H2}$	U. de pH	6	
Límite inferior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{LL,H2}$	U. de pH	5	
Límite superior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{\text{UL},\text{acet/acid}}$	U. de pH	5.5	
Límite inferior de inhibición al 50% de microorganismos	$pH_{LL,acet/acid}$	U. de pH	4	

 \bigotimes

*Parámetros añadidos por la extensión de balance de materia (Rosen y Jeppsson, 2006).

Descripción	Nomenclatura	Unidades	Valor
Constante de disociación del agua	Kw	М	2.39281E-14
Constante de disociación ácida de valerato	K _{a,va}	М	1.38038E-05
Constante de disociación ácida de butirato	K _{a,bu}	М	1.51356E-05
Constante de disociación ácida de propionato	$K_{a,pro}$	М	1.31826E-05
Constante de disociación ácida de acetato	K _{a,ac}	М	1.7378E-05
Constante de disociación ácida de dióxido de carbono	K _{a,CO2}	М	5.033E-07
Constante de disociación ácida de nitrógeno inorgánico	K _{a,IN}	М	1.26542E-09
Constante de disociación ácida de amonio	K _{a,NH4}	М	5.62341E-10
Presión atmosférica (en la ZMVM)	P _{atm}	Bar	0.779898525
Presión de gas de agua	$P_{gas,H2O}$	Bar	0.062742111
Constante de equilibrio de los gases	k _ρ	$\frac{m^3}{d \ bar}$	5.00E+04
Coeficiente de transferencia	K _{La}	$\frac{1}{d}$	10
Constante de Henry de Hidrógeno	K _{h,H2}	$rac{M_{liq}}{bar}$	0.000730737
Constante de Henry de Metano	K _{h,CH4}	$\frac{M_{liq}}{bar}$	0.001120997
Constante de Henry de Dióxido de Carbono	K _{h,CO2}	$\frac{M_{liq}}{bar}$	0.03412747
Presión total del espacio de cabeza	Pgas	bar	1.013
Constante de los gases	R	bar <u>M K</u>	8.31E-02

Valores de parámetros fisicoquímicos.



Anexo IV. Resultados de la experimentación en la UPIIA.

Para evaluar la predictibilidad del modelo cinético desarrollado, se efectuó un análisis experimental mediante pruebas en laboratorio de potencial de metano de una muestra de FORSU, utilizando un inóculo de lodos anaerobios de tipo granular (LG) obtenidos de un reactor UASB. Las características de la FORSU base empleada se muestran en la tabla siguiente:

Parámetro	Valor
Humedad (%)	75.6
STT (mg/kg)	244,464.0
SFT (mg/kg)	52,784.0
SVT (mg/kg)	191,680.0
DQO (mg/kg)	247,050.0
N-K (mg/kg)	6,358.0
Cenizas (mg/kg)	47,146.9
Grasas (mg/kg)	23,243.1
Proteínas (mg/kg)	39,735.4
DBO (mg/kg)	106,562.0
Carbohidratos (mg/kg)	128,702.0
Fibras (mg/kg)	46,468.0

Resultados de caracterización de la muestra de FORSU.

*Valores por kg de FORSU.

Se efectuaron dos análisis experimentales de potencial de metano por triplicado, para lo cual prepararon muestras de 300 mL, con una relación de inóculo de 2:1 respecto al contenido de los sólidos volátiles. El primer análisis experimental de potencial de metano se conformó por una muestra de FORSU base diluida al 10% y mezclada con lodos anaerobios de tipo granular, cumpliendo la relación de 2:1 respecto a los sólidos volátiles.

Los datos específicos de la conformación de muestras para la experimentación se muestran en la tabla siguiente.

Experimento	Muestra	%ST	%SV	Relación SV _{Lodo} :SV _{FORSU}	% en muestra	VOL (mL)
1	FORSU 10%	9.39	7.31	2:1	35.16	105.48
	LG	9.30	7.93		64.83	194.52

Conformación de muestras empleadas para potencial de metano.

Se conformaron tres muestras individuales, así como un blanco conteniendo sólo lodos sin FORSU, para realizar el ajuste de resultados experimentales con base en la producción de metano de la muestra blanco.

La experimentación se llevó a cabo en un equipo de cuantificación automática de potencial de metano, marca Bioprocess Control, modelo AMPTS II. El equipo cuenta con un baño de agua para mantener la temperatura de botes de 500mL. La temperatura empleada para la experimentación fue de 37°C. Asimismo, el equipo cuenta con pequeños botes fijadores de CO₂, que remueven el CO₂ del biogás generado por medio de una solución acuosa de NaOH 3M, para cuantificar únicamente el metano generado por el proceso de digestión anaerobia. Cuenta con un software que permite monitorear la producción en continuo de las muestras analizadas, a su vez que realiza los cálculos para entregar una cuantificación de metano generado con un volumen normalizado de acuerdo a los datos de la experimentación.

En la siguiente tabla se presentan los resultados obtenidos en la prueba de potencial de metano en un proceso de digestión anaerobia húmeda, empleando una mezcla de lodo granular con FORSU diluida al 10% de ST (L.G.H). Estos resultados incluyen la producción bruta de metano para la muestra analizada por triplicado, así

como un promedio de la producción neta al quitarle la producción de metano del blanco.

Πίλ	BLANCO L.G.h	LG.1 [NmL/d]	LG.2 [NmL/d]	LG.3 [NmL/d]		
DÍA 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 9 10 11	[Nml/d]	bruto	bruto	bruto		
0	0	0	0	0		
1	183.1	1449.9	1193.6	1451.7		
2	283.9	1915.6	1737	1920.6		
3	361.3	2164.5	1986.1	2169.1		
4	428.6	2344.4	2167.9	2343.6		
5	491.6	2502	2316.7	2493.6		
6	549.4	2707	2506.1	2690.1		
7	608.8	2987	2794.3	2970.1		
8	663.2	3317.3	3105.5	3319.5		
9	712.9	3672.5	3478.4	3633.9		
10	759.4	3847.3	3686.5	3797.5		
11	803.5	3972.6	3810.3	3915.3		
12	845	4064	3904.8	4005.5		
13	881.8	4138.3	3978.3	4077		
14	917.7	4205.2	4042.4	4142.4		
15	951.4	4264.1	4096.4	4199.4		
16	982.4	4319.1	4145.4	4253.4		
17	994	4347.1	4173.8	4281.1		

Producción experimental de metano.





Herramienta de simulación en Excel. Sección de Datos.

50

Sección de Rdes.

x∎ ARC⊢		io insertai	R DISEÑC) DE PÁGINA	FÓRMULAS	DATOS	Modelaci REVISAR VI	ón ADM1 V2_4 STA NITR	DAMS_vlab_07 O PRO 9	709.xlsm - Exc	el							? 📧 — Mariela Castil	6 X
A1	Ŧ	: × .	$\checkmark f_x$																~
	Α	В	с	D	Е	F	G	н	1	J		к	L	М	N		0	Р	A
1																			
2																			
3																			
4																			
5	1	t (a)	Rdes	K1	K2	K3	K4												
7	1	0.002		15 0942165	15.0762207	15.9921002	15.96944975												
0	2	0.002		15 9694497	15.9605699	15 9605729	15 95269676			-			R	_					
0	2	0.004		15 9526968	15 9448247	15.5005720	13.33203070	15 9369605		-			- · de	s					
10	4	0.008		15.9369605				15,92124		18									_
11	5	0.01		15.92124				15.9055352		16									
12	6	0.012		15.9055352				15.8898461		= ¹⁴	1								
13	7	0.014		15.8898461				15.8741726	i	E 12									
14	8	0.016		15.8741726				15.8585148	1	8 10									
15	9	0.018		15.8585148				15.8428727	1	8 ⁸									
16	10	0.02		15.8428727				15.8272462	1	¥ 6									
17	11	0.022		15.8272462				15.8116353	1	4									
18	12	0.024		15.8116353				15.7960401		2		\sim							
19	13	0.026		15.7960401				15.7804604	1	0									
20	14	0.028		15.7804604				15.7648963			0	5	10	15	20	25			
21	15	0.03		15.7648963				15.7493478					1	(d)					
22	16	0.032		15.7493478				15.7338148											
23	17	0.034		15.7338148				15.7182973											
24	18	0.036		15.7182973				15.7027954	1										
25	19	0.038		15.7027954				15.687309											
26	20	0.04		15.687309				15.671838											
27	21	0.042		15.671838				15.6563826	i										
28	22	0.044		15.6563826	1 1			15.6409426	i 	 [1	1	-	1	1 -		-
-	· …	Kdes RhC	n RhPr	RhLi RcS	u RcAa	RCFa RC	a RcBu	RCPro RC	AC RCH2	RdXsú	RdXaa	RdXfa	RdXc4	RdXpro	RdXac	RdXh2	Ssu	<mark>Si</mark> (†	9 :

Sección de Saa.

*i*CO

ARCHI	VO INICI	O INSERTA	R DISEÑO	DE PÁGINA	FÓRMULAS	DATOS	REVISAR	VISTA NITR	to pro 9								Ma	ariela Castil	llo - 🎆
A1	Ŧ	1 ×	$\checkmark f_x$																~
	Α	В	С	D	E	F	G	н	1	J	к	L	м	1	N	0		Р	(🔺
1																			
2																			
3																			
4																			
5	i	t (d)	Saa	K1	K2	К3	К4	ΔSaa	Saa*	Saa'									
6	0	0	0.001	-0.14505773	-0.07701396	-0.09398779	-0.03460023	-0.00017389											
7	1	0.002	0.00082611	-0.0380476	0.00317709	-0.00724058	0.02866808	-5.8355E-06										~	
8	2	0.004	0.00082028	0.02655159	0.05131378	0.0449306	0.06644012	9.516E-05			∆Caa	∆Saacorr		_				Saa	ı i
9	3	0.006	0.00091544	0.0651429				0.00015397	0.00107494	0.08674379 n	ada	nada		_	0.014				
10	4	0.008	0.0010694	0.08809609				0.00018962	0.0012633	0.10008328 n	ada	nada		_	0.012				
11	5	0.01	0.00125902	0.10112523				0.0002096	0.00147032	0.10768915 n	ada	nada			0.012	٨			
12	6	0.012	0.00146863	0.10810101				0.00021973	0.00168966	0.11114665 n	ada	nada		<u></u>	0.01				
13	7	0.014	0.00168835	0.11146534				0.00022417	0.00191347	0.11240044 n	ada	nada			0.008	H			
14	8	0.016	0.00191252	0.11262983				0.00022515	0.00213817	0.11234153 n	ada	nada		ō	0.006				
15	9	0.018	0.00213767	0.11246237				0.000224	0.00236197	0.11142966 n	ada	nada		2°	0.000				
16	10	0.02	0.00236167	0.11150251				0.00022159	0.00258346	0.11002553 n	ada	nada			0.004				
17	11	0.022	0.00258326	0.11007345				0.00021845	0.00280183	0.10834273 n	ada	nada		_	0.002				
18	12	0.024	0.00280172	0.10837092				0.00021489	0.00301667	0.10649836 n	ada	nada		_	0				
19	13	0.026	0.00301661	0.10651505				0.00021109	0.00322774	0.10456835 n	ada	nada		_		, ,	5	10	
20	14	0.028	0.0032277	0.10457876				0.00020718	0.00343491	0.10259991 n	ada	nada		_					t (d)
21	15	0.03	0.00343488	0.10200024				0.00020323	0.00303812	0.10062058 h	ada	nada		_					
22	10	0.032	0.00303811	0.10062437				0.00019527	0.00365739	0.09604713 1	aua	naua							
23	10	0.034	0.00383738	0.09804940				0.00019534	0.00403272	0.09668987 1	ada	nada							
24	10	0.030	0.00405271	0.0900915				0.00019144	0.00422410	0.09394575 n	aua	nada							
26	20	0.056	0.004/1175	0.03473370				0.0001870	0.00441170	0.09284373 1	aua ada	nada							
27	20	0.042	0.00459556	0.09096492				0.00018301	0.00433550	0.09911226 p	ada	nada							
28	22	0.044	0.00477563	0.08911247				0.0001764	0.00495203	0.08728958 n	ada	nada							v
4		Ssu Saa	Sfa Sva	Sbu S	pro Sac	Sh2 Sch	4 Sic Si	in Si Sn	h3 Sco2	Xc Xch	Xpr X	li Xsu X	aa Xfa	Xc4	Xpro	Xac	Xh2	@	F) :

Sección de Tabla A3 DQO.

ARCHIVO INICIO INSERTAR	DISEŃ	ÑO DE F	PÁGINA	FÓRM	IULAS	DATOS	M REVISAR	odelación AE VISTA	DM1 V2_ADAMS_vlab_ NITRO PRO 9	0709.xlsm - Excel					? 📧 — 🗗 🗙 Mariela Castillo 👻
A1 🔹 : 🗙 🗸	f _x	'Tab	ola A3. Coe	ficien	ites de vel	locidad b	ioquímico	os (vi,j) y eo	cuaciones cinéticas	(pj) para comp	onentes soluble	es (i=1 - 24, j= 1- :	19)		~
AB		с	D		E		F		G	н	I	J	К	L	M
1 Tabla A3. Coeficientes de ve	elocidad	bioqu	iímicos (v _{i,j}) y ec	uaciones c	inéticas (p _j) para c	omponent	es solubles (i=1 - 2	4, j= 1- 19)					
2 Componente →		i	1		2		3		4	5	6	7	8	9	10 S
3 J Proceso V		-	3 _{SU}	-	Jaa	1	o _{fa}		3 _{va}	Sbu	Spro	Jac	Shz	Sch4	5 _{IC}
4 1:Desintegración 5 2:Hidrólisis de carbobida	atos		1												
6 3 Hidrólisis de proteínas	0105		.		1							+			
7 4 Hidrólisis de lípidos			0.05			1	0.95	5							
8 5 Consumo de azúcares			-1							0.117	0.243	0.369	0.171		$-\sum_{i=9,11-24} C_i v_{i,5}$
9 6 Consumo de aminoácio	dos				-1				0.2116	0.2392	0.046	0.368	0.0552		$-\sum_{l=1-9,11-24} C_l v_{l,6}$
10 7 Consumo de AGCL							-1					0.658	0.282		
11 8 Consumo de valerato									-1		0.5076	0.2914	0.141		L
12 9 Consumo de butanoato	D									-1		0.752	0.188		
13 10 Consumo de propinoat	to										-1	0.5472	0.4128		$-\sum_{i=1-9,11-24}C_i v_{i,10}$
14 11 Consumo de acetato												-1		0.95	$-\sum_{i=1-9,11-24}C_i v_{i,11}$
													-1	0.94	$-\sum_{i}C_{i}v_{i,12}$
↓ ↓ … Xsu Xaa	Xfa	Xc4	Xpro	Xac	Xh2	Xi Ta	bla A3	T A3 vel	Tabla A3 DQO	Tabla 6.1	Tabla 6.2 Ap	éndice A Tab	bla 4.1 Tabla	4.2 Ecuaci	ones 🕀 :
LISTO													⊞	8 🗉 -	+ 100 %

Ноја	Descripción	Ноја	Descripción
Datos	Descripción de parámetros iniciales	RdXh2	Rapidez de decaimiento de degradadores de hidrógeno particulados
Ctes	Valores utilizados de las constantes utilizadas en las ecuaciones del modelo	Ssu	Concentración de monosacáridos
рН	Cálculos de concentraciones de iones y pH	Saa	Concentración de aminoácidos
lin,lim	Inhibición por nitrógeno inorgánico	Sfa	Concentración de ácidos grasos
lh2,fa	Inhibición de consumo de ácidos grasos por hidrógeno	Sva	Concentración de valerato
lh2,c4	Inhibición de consumo de valerato y butirato debida al hidrógeno	Sbu	Concentración de butirato
lh2,pro	Inhibición de consumo de propionato debida al hidrógeno	Spro	Concentración de propionato
Inh3	Inhibición debida al amoniaco	Sac	Concentración de acetato
lph,i	Inhibición debida al pH Sh2		Concentración de hidrógeno disuelto
Pg,i	Presión parcial de los gases (Hidrógeno, metano y CO ₂)	Sch4	Concentración de metano
RtH2	Rapidez de transferencia de hidrógeno gas	Sic	Concentración de carbono inorgánico
RtCH4 Rapidez de transferencia de metano gas		Sco2	Concentración de dióxido de carbono disuelto

Descripción de las hojas que componen el libro.

Ноја	Descripción	Ноја	Descripción
RtCO2	Rapidez de transferencia de dióxido de carbono gas	Sin	Concentración de nitrógeno inorgánico
Sh2,g	Concentración de hidrógeno en fase gaseosa	Si	Concentración de inertes
Sch4,g	Concentración de metano en fase gaseosa	Хс	Concentración de compuestos particulados
Sco2,g	Concentración de dióxido de carbono en fase gaseosa	Xch	Concentración de carbohidratos particulados
Velocidades	Valores puntuales de las ecuaciones de rapidez utilizadas en el modelo	Xpr	Concentración de proteínas particuladas
Rdes	Rapidez de desintegración	XIi	Concentración de lípidos particulados
RhCh	Rapidez de hidrólisis de carbohidratos	Xsu	Concentración de degradadores de azúcar particulados
RhPr	Rapidez de hidrólisis de proteínas	Xaa	Concentración de degradadores de aminoácidos particulados
RhLi	Rapidez de hidrólisis de lípidos	Xfa	Concentración de degradadores de LCFA
RcSu	Rapidez de consumo de monosacáridos	Xc4	Concentración de valerato y butirato particulado
RcAa	Rapidez de consumo de aminoácidos	Хрго	Concentración de degradadores de propionato particulados
RcFa	Rapidez de consumo de ácidos grasos	Хас	Concentración de degradadores de acetato particulados

Ноја	Descripción	Ноја	Descripción
RcVa	Rapidez de consumo de valerato	Xh2	Concentración de degradadores de hidrógeno particulados
RcBu	Rapidez de consumo de butirato	Xi	Concentración de inertes particulados
RcPro	Rapidez de consumo de propionato	Tabla A3	Matriz del modelo ADM1 de coeficientes bioquímicos de rapidez y ecuaciones cinéticas de rapidez para componentes solubles.
RcAc	Rapidez de consumo de acetato	Tabla A3 Vel	Evaluación de las ecuaciones de rapidez en la matriz de ecuaciones del modelo ADM1
RcH2	Rapidez de consumo de hidrógeno	Tabla A3 DQO	Evaluación de valores de DQO en la matriz de ecuaciones del modelo ADM1
RdXsu	Rapidez de decaimiento de degradadores de azúcar particulados	Tabla 6.1	Parámetros estequiométricos sugeridos, sensibilidad cualitativa y variabilidad para el modelo ADM1
RdXaa	Rapidez de decaimiento de degradadores de aminoácidos particulados	Tabla 6.2	Valores de los parámetros sugeridos, sensibilidad cualitativa y variabilidad para el modelo ADM1
RdXfa	Rapidez de decaimiento de consumidores de LCFA particulados	Apéndice A	Revisión de los parámetros cinéticos utilizados en el modelo

Ноја	Descripción	Ноја	Descripción
RdXc4	Rapidez de decaimiento de valerato y butirato particulados	Tabla 4.1	Coeficientes de equilibrio ácido-base utilizados en el modelo ADM1
RdXpro	Rapidez de decaimiento de degradadores de propionato particulados	Tabla 4.2	Valores de parámetros de transferencia líquido- gas utilizados en el modelo
RdXac	Rapidez de decaimiento de degradadores de acetato particulados	Ecuaciones	Ecuaciones de rapidez utilizadas en el modelo

Anexo VI. Datos utilizados para la validación.

"Semi-dry mesophilic anaerobic digestion of water sorted organic fraction of municipal solid waste (WS-OFMSW)" (Dong, 2010).

Los ensayos realizados fueron llevados a cabo en reactores batch a pequeña escala con un volumen total de 35 L. Se recolectaron 20 toneladas de RSOM del área de Guangdong Boluo (China) las cuales fueron transportadas a la planta de tratamiento de residuos. La fracción biodegradable clasificada mediante la tecnología de separación en agua fue llevada a cabo en un tanque de mezclado.

La materia prima de 21.5, 18.1 y 15.2 kg fueron alimentados en tres reactores respectivamente. Todos los reactores fueron inoculados con inóculo 20% w/w. Se añadió agua para obtener el porcentaje de sólidos totales deseados en el reactor (11%, 13.5% y 16%). El volumen utilizado para todos los reactores fue de aproximadamente 75% con el fin de evitar la obstrucción de tuberías la cual puede ser resultado de la expansión del material de digestión. La siguiente tabla presenta las características de la FORSU clasificada con agua.

Parámetro	Unidad	WS-OFMSW	
Tamaño de partícula	mm	≤10	
Densidad	g/L	933	
Sólidos totales	g/kg	184	
Calor	MJ/kgST	21.0	
Sólidos volátiles	% de ST	61.6	
Cenizas	% de ST	38.4	
Carbohidratos	% de ST	37.8	
Fibras	% de ST	8.4	
Proteínas	% de ST	14.2	

Características de WS-OFMSW.

Parámetro	Unidad	WS-OFMSW
TKN	% de ST	2.3
Lípidos	% de ST	9.6
Carbono	% de ST	37.7
Hidrógeno	% de ST	5.7
Oxígeno	% de ST	14.9
Nitrógeno	% de ST	3.3
Azufre	% de ST	0.1
Fósforo	% de ST	0.2
Relación C:N		11.4
рН		5.3
VFAs	VFAs/mg L	431
NH4+-N	NH4 ⁺ -N/mg L	114
PMT*	L/kgSV	713
PMT**	L/kgSV	508

*Potencial de metano teórico basada en la composición elemental (C, H, O, N).

**Potencial de metano teórico basado en la composición de componentes (carbohidratos, proteínas y lípidos).

El pH inicial fue de 5.4, 5.6 y 5.7 para las experimentaciones con 16%, 13.5% y 11% de sólidos totales respectivamente. Una solución de 300mL 3N de NaOH fue añadida a los reactores al final del primer día para incrementar el pH a 6.8, 6.9 y 7.0 respectivamente. La DA anaerobia fue llevada a cabo a $30\pm2^{\circ}$ C.

Utilizando AutoCAD, se obtuvieron datos experimentales de las gráficas expuestas por el artículo para poder realizar una comparación cuantitativa entre los resultados proporcionados y los valores obtenidos a partir de la simulación. Estos valores se muestran en la gráfica siguiente. (W)

Día	CH₄ acumulado	CH₄ acumulado
Dia	(L/kgSV) 11%ST	(L/kgSV) 13.5%ST
0	0.0	0.0
2.5	8.5	3.0
5	53.0	29.0
7.5	82.0	39.0
10	116.0	49.0
12.5	163.0	69.0
15	211.0	86.0
17.5	250.0	107.0
20	262.0	130.0
22.5	269.0	152.5
25	275.0	191.0
27.5	280.0	230.0
30	284.0	247.4
32.5	289.0	254.0
35	293.0	259.0
37.5	296.0	263.0
40	299.0	267.0

Valores experimentales obtenidos con AutoCAD

Cálculo de la DQO de diferentes compuestos

La DQO es un parámetro que mide la cantidad de sustancias disueltas o en suspensión en una muestra líquida susceptibles de ser oxidadas por medios químicos. Este parámetro se mantiene estable en un sistema anaerobio por lo que la suma de la DQO de entrada debe ser igual a la suma de la DQO de salida como se muestra a continuación:

$$DQO_{afluente} = DQO_{efluente} + DQO_{biogás}$$

Puede calcularse por estequiometría la DQO como la cantidad de oxígeno requerido para oxidar los diferentes compuestos a dióxido de carbono y agua como se muestra a continuación:

• Carbohidratos (glucosa)

$$C_6 H_{12} O_6 + 6O_2 \to 6CO_2 + 6H_2 O$$

$$DQO_{CH} = \frac{\left(32\frac{g}{mol}\right)(6mol)}{\left(116\frac{g}{mol}\right)(1mol)} = 1.655\frac{gDQO}{gCH}$$

• Proteínas (promedio)

$$C_{13}H_{25}O_7N_3S + 13O_2 \rightarrow 13CO_2 + 7H_2O + 3NH_3 + H_2S$$

$$DQO_{PR} = \frac{\left(32\frac{g}{mol}\right)(13mol)}{\left(367\frac{g}{mol}\right)(1mol)} = 1.1335\frac{gDQO}{gCH}$$

o Lípidos (triglicérido palmítico)

$$2C_{51}H_{98}O_6 + 145O_2 \rightarrow 102CO_2 + 98H_2O$$

Como en el modelo se menciona que:

$$2320 \frac{gDQO}{mol}$$

Entonces:

$$\frac{2320\frac{gDQO}{mol}}{806\frac{gLI}{mol}} = 2.878\frac{gDQO}{gLI}$$

• Biomasa (promedio)

$$C_5 H_7 N O_2 + 5 O_2 \rightarrow 5 C O_2 + 2 H_2 O + 7 N H_3$$

$$DQO_B = \frac{\left(32\frac{g}{mol}\right)(5mol)}{\left(113\frac{g}{mol}\right)(1mol)} = 1.416\frac{gDQO}{gCH}$$

Experimentación - Cálculo de la concentración inicial de material complejo

La concentración inicial del material complejo en las unidades correspondientes se calcula en base a los datos experimentales como se muestra a continuación. Al ser la FORSU diluida al 9.39% de sólidos totales, la DQO de la muestra diluida se determina como sigue:

$$\frac{gDQO}{kg_m} = \frac{\left(73.1\frac{gSV_m}{kg_m}\right)\left(247.05\frac{gDQO}{kg_m}\right)}{191.68\frac{gSV_m}{kg_m}} = 94.216\frac{gDQO}{kg_m}$$

Considerando una densidad de 1g/ml para la muestra de FORSU utilizada:

$$0.10548kg_m\left(95.216\frac{gDQO}{kg_m}\right) = 9.938gDQO$$

Y al realizar experimentaciones con muestras de 300mL, se tiene que la concentración inicial de material complejo es la siguiente:

$$\frac{9.938gDQO}{0.3L} = 33.1264 \frac{gDQO}{L} = 33.1264 \frac{kgDQO}{m^3}$$



En el experimento se menciona que se tiene un 7.93% de SV en los lodos granulares utilizados. Por lo que al multiplicar por la DQO de la biomasa:

$$79.3 \frac{gSV_m}{kg_m} \left(1.416 \frac{gDQO_B}{kg_m} \right) = 112.2888 \frac{gDQO_B}{kg_m}$$

Considerando una densidad de 1g/ml para la muestra de biomasa utilizada:

$$0.19452kg_m \left(112.2888 \frac{gDQO_B}{kg_m} \right) = 21.8424gDQO_B$$

Al conformar muestras de 300mL, se tiene que la concentración inicial de biomasa es la siguiente:

$$\frac{21.8424gDQO}{0.3 L} = 72.8081 \frac{gDQO}{L} = 72.8081 \frac{kgDQO}{m^3}$$

Cálculo de la concentración inicial de carbono inorgánico

La concentración inicial de carbono debe ser la de equilibrio de acuerdo al siguiente esquema de reacción:

$$CO_2 + H_2O \leftrightarrow H_2CO_3 + H_2O \leftrightarrow H^+ + HCO_3^-$$

En el equilibrio se tiene una atmósfera conformada únicamente por CO₂. De acuerdo con la Ley de Henry:

$$K_{H,CO2}P_{gas,CO2} - S_{liq,CO2} = 0$$

Donde: $K_{H,CO2}$ es la constante de Henry para el gas CO₂ (0.03413 kmol/m³bar), P_{gas,CO2} es la presión parcial del mismo (1.013 bar) y S_{liq,CO2} es la concentración del CO₂ en la fase líquida. Por lo tanto:

$$S_{liq,CO2} = 0.0346 \frac{kmol}{m^3}$$

Como:

$$S_{HCO_3^-} = \frac{k_{A,CO2} S_{IC}}{k_{a,CO2} + S_{H^+}}$$

Y:

$$S_{CO2} = S_{IC} - S_{HCO_3^-}$$

Entonces:

$$S_{IC} = \frac{S_{CO_2}(k_{A,CO_2} + S_{H^+})}{S_{H^+}}$$

Donde: $k_{A,CO2}$ es la constante de disociación ácida del CO₂ (5.033x10⁻⁷ kmol/m³) y S_{H+} es la concentración inicial de protones debida al pH del sistema que se considera neutro (10⁻⁷ kmol/m³). Por lo tanto:

$$S_{IC} = 0.2086 \frac{kmol}{m^3}$$

Conversión de unidades de las gráficas obtenidas de la literatura

De la Figura 18 se aproxima la concentración máxima de VFAs producidos a 4250 mg/L. Siendo el propionato el principal contribuyente y utilizándolo como base en los cálculos.

$$4250 \frac{mg}{L} \left(\frac{1 \ g}{1000 \ mg}\right) \left(\frac{1 \ mol}{74.08 \ g}\right) \left(\frac{112 \ gDQO}{1 \ mol}\right) = 6.425 \frac{gDQO}{L}$$

De la Figura 26 se aproxima la concentración máxima de VFAs producidos a 6750 mg/L. Por lo tanto:

$$6750 \frac{mg}{L} \left(\frac{1 \ g}{1000 \ mg}\right) \left(\frac{1 \ mol}{74.08 \ g}\right) \left(\frac{112 \ gDQO}{1 \ mol}\right) = 10.205 \frac{gDQO}{L}$$