

Aplicación de las Herramientas de Modelado y Simulación a las Tecnologías Anaerobias

Dr. Juan Antonio Yáñez Varela ^a

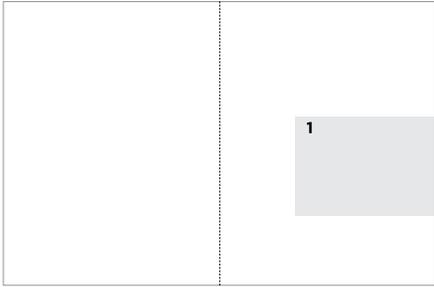


Acerca del autor

^a Académico de la Unidad de Estudios Superiores Tultitlán, Universidad Mexiquense del Bicentenario, Estado de México.

Resumen

Este artículo destaca la importancia y el impacto de las herramientas computacionales de simulación, en la mejora de los procesos de digestión anaerobia. Se exploran tres métodos principales: la simulación modular, la orientada a ecuaciones y la física, cada uno con objetivos específicos. Dichas herramientas son fundamentales para el desarrollo



<https://emaningenieria.com/que-son-biocombustibles-y-para-que-se-utilizan/>

de tecnologías anaerobias más eficientes y demuestran el potencial de la digestión anaerobia como una solución sostenible para el manejo de residuos líquidos y sólidos. Además, el documento resalta las significativas contribuciones del Laboratorio de Tecnología Anaerobia del Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, poniendo de manifiesto su papel en la promoción de investigaciones y avances tecnológicos en este ámbito, así como la invitación abierta para que los futuros ingenieros contribuyan a estos esfuerzos.

Palabras Clave: Digestión Anaerobia, Simulación Modular, Simulación Orientada a Ecuaciones, Simulación Física, Programación.

Abstract

This article highlights the importance and impact of computational simulation tools in the improvement of anaerobic digestion processes. Three main methods are explored: modular simulation, equation-oriented simulation, physical simulation, each with specific objectives. These tools are critical for the development of more efficient anaerobic technologies and demonstrate the potential of anaerobic digestion as a sustainable solution for liquid and solid waste management. In addition, the document underlines the significant contributions of the Anaerobic Technology Laboratory of the Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, highlighting its role in promoting research and technological advances in this field, as well as the open invitation for future engineers to contribute to these efforts.

Keywords: Anaerobic Digestion, Modular Simulation, Equation-Oriented Simulation, Physical Simulation, Programming.



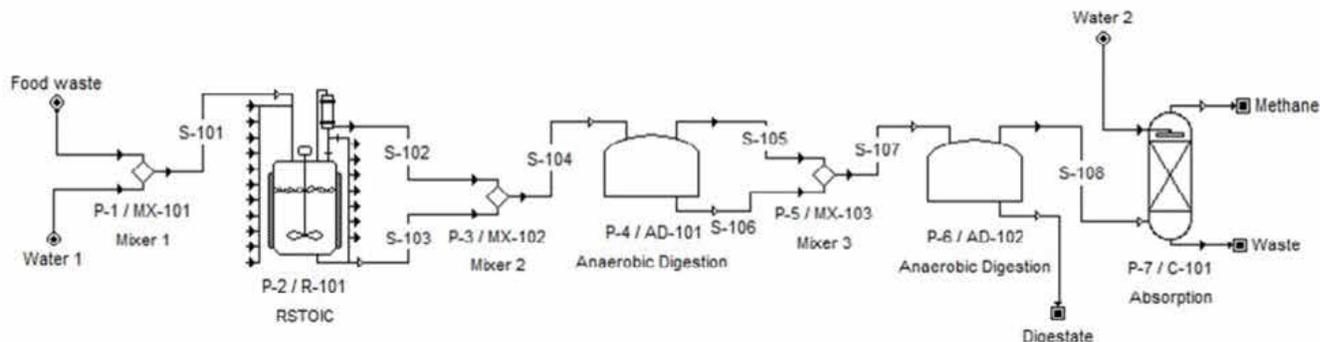
Introducción

Sería difícil negar el impacto positivo que han provocado las herramientas computacionales en las distintas ramas de la Ingeniería Bioquímica, al facilitar el diseño, la optimización y la síntesis de diversos procesos. Estas herramientas, comúnmente referidas como software, son esenciales para resolver ecuaciones que emergen de principios fundamentales, como las leyes de conservación de masa y energía, la cinética biológica, los fenómenos de transporte y los aspectos termodinámicos que son cruciales para calcular las propiedades de las sustancias involucradas.

Como se ha destacado en este número especial de la revista *Tecnocultura*, la digestión anaerobia se presenta como un bioproceso definido y estratégico para abordar problemas ambientales y energéticos. La evolución en la capacidad de cómputo ha permitido el desarrollo de variados softwares dedicados al estudio y optimización de este proceso. Las herramientas de modelado y simulación se clasifican según el enfoque que utilizan para resolver las ecuaciones matemáticas que describen la digestión anaerobia. A continuación, exploraremos los distintos enfoques de simulación empleados en ingeniería bioquímica, junto con ejemplos de su aplicación en la digestión anaerobia.

1. Simulación modular

En el mundo de la ingeniería química y bioquímica, la simulación modular se destaca por su enfoque práctico y visual. Imaginemos la construcción de un rompecabezas en donde cada pieza representa un paso específico del proceso a estudiar, en este caso la digestión anaerobia. Por tanto, cada pieza del rompecabezas es un módulo que simboliza una operación unitaria dentro de un diagrama de flujo de procesos. Esos módulos están diseñados para ser intuitivos: al insertar datos específicos, calculan automáticamente los



parámetros esenciales y los resultados de cada paso, utilizando ecuaciones de diseño ya programadas.

El software comercial como BioWind y SuperPro Designer, son ejemplos de herramientas que integran módulos de digestores anaerobios, con los que se puede calcular detalladamente los parámetros de diseño de un digestor, teniendo en cuenta la cinética biológica. Por ejemplo, utilizan la ecuación de Monod para describir cómo los microorganismos crecen y consumen sustratos, o la ecuación de Haldane, para entender cómo ciertas sustancias pueden inhibir este crecimiento.

La ventaja de dichos softwares radica en su capacidad para simular no solo el propio digestor anaerobio, sino también cómo interactúa con otros procesos



<https://emaningenieria.com/que-son-biocombustibles-y-para-que-se-utilizan/>

Figura 1

Diagrama de la simulación modular del proceso de digestión anaerobia. Tomado de: Harun *et al.* (2019).

antecedentes y predecesores en la marcha del proceso, permitiendo una visión integral y práctica para evaluar la viabilidad industrial.

Un ejemplo claro de la utilidad de la simulación modular, se encuentra en el trabajo de Harun *et al.* (2019), quienes emplearon SuperPro Designer para predecir la composición del biogás a partir de residuos alimenticios, mediante tres módulos de reacción que representan las etapas hidrolíticas, acidogénica y metanogénica de la digestión anaerobia, mientras que un módulo separador por absorción se utiliza para purificar el metano (Figura 1). Mediante ese estudio, fue posible obtener un biogás con una composición de 57% de metano, que se pudo purificar hasta en un 98%.

2. Simulación orientada a ecuaciones

La simulación orientada a ecuaciones se centra en emplear métodos numéricos para solucionar modelos matemáticos que describen con precisión el proceso de digestión anaerobia. Esta metodología se apoya en los balances de materia y energía para explicar la transformación de los materiales y la conservación o cambio de energía a lo largo del proceso. Dichos balances se expresan mediante ecuaciones diferenciales que, aunque complejas y dinámicas, se pueden manejar eficientemente con lenguajes de programación como Python, Matlab, o Fortran. Estos lenguajes son herramientas potentes, equipadas con subrutinas que simplifican la resolución de estas ecuaciones, modelando así el comportamiento del proceso y permitiendo simular las variaciones de concentraciones de distintos compuestos a través del tiempo o el espacio.

La habilidad de la simulación orientada a ecuaciones para controlar y optimizar variables cruciales del proceso -tales como la velocidad de descomposición de la materia orgánica insoluble, los niveles de ácidos grasos volátiles, el pH y la producción de metano- la convierte en una ventana invaluable hacia la mejora del rendimiento de la digestión anaerobia.

Un modelo emblemático dentro de esta metodología, es el Anaerobic Digestion Model 1 (ADM1), recomendado por la Asociación Internacional del Agua (IWA). Este modelo reúne balances de materia para elementos clave en la digestión anaerobia, mediante un sistema de 32 ecuaciones diferenciales ordinarias, abarcando tanto aspectos cinéticos como de transferencia de



masa (Batstone *et al.*, 2002). Así, el ADM1 ofrece una aproximación robusta y fiable del proceso, posicionándose como una herramienta esencial para la investigación y optimización de sistemas de digestión anaerobia.

Sin embargo, dada la complejidad y la gran cantidad de parámetros cinéticos y propiedades de transporte que requiere el modelo ADM1, algunos investigadores optan por simplificar el número de variables implicadas. Esta simplificación busca evitar la necesidad de comprender en detalle ciertos aspectos que pueden considerarse procesos opacos (“caja negra”), sin comprometer la precisión de las predicciones del modelo. Un ejemplo de este enfoque es el modelo propuesto en Hill (1983), que se concentra en cinco ecuaciones diferenciales, representando los balances de materia de componentes clave como la cantidad de sustrato, concentración de ácidos grasos volátiles, biomasa acidogénica y metanogénica, y el flujo de metano. Recientemente, Ganeshan y Rajendran (2022) demostraron que este modelo sigue siendo relevante y puede predecir con un 92% de precisión, el comportamiento de diversos digestores anaerobios.

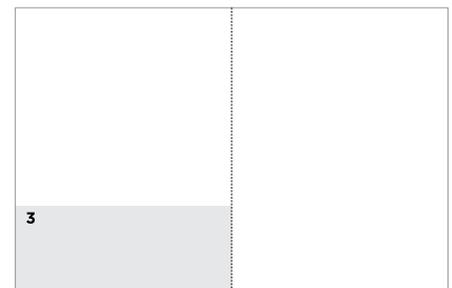
3. Simulación física

La simulación física, comúnmente referida en el ámbito de la ingeniería como simulación de Dinámica Computacional de Fluidos (CFD), se dedica a resolver numéricamente las ecuaciones que describen el transporte de momento, masa y energía dentro de un espacio definido. Este enfoque destaca por su capacidad para detallar la distribución de variables tanto vectoriales (por ejemplo la velocidad de los fluidos), como escalares (que es el caso de la concentración y temperatura en el volumen ocupado por un dispositivo específico, por ejemplo, un reactor anaerobio).

La utilidad de la simulación física radica en su habilidad para explorar en detalle el impacto de la geometría de un reactor sobre su rendimiento. Esto se logra mediante la modificación computacional del diseño geométrico del reactor, sin alteraciones físicas, permitiendo evaluar cómo estos cambios influyen en la velocidad, concentración y temperatura. Para llevar a cabo estas simulaciones con éxito, es crucial conocer de antemano las propiedades físicas de las sustancias involucradas, como la viscosidad, densidad, difusividad, conductividad térmica, entre otras, así como las ecuaciones auxiliares, que incluyen velocidades de reacción o correlaciones específicas.

El proceso de simulación CFD se divide en tres etapas fundamentales: *preprocesado*, *procesado* y *postprocesado*. Durante el *preprocesado*, se digitaliza la geometría del reactor utilizando software de dibujo asistido por computadora. Esta geometría se divide luego en pequeños elementos (triangulares o cuadrados) mediante la discretización para aplicar el método de volumen finito. En la fase de *procesado*, se definen las regiones específicas de la geometría (entradas, salidas, paredes, etcétera) y se establecen las propiedades de los componentes del digestor. Además, se seleccionan los modelos y algoritmos de solución adecuados para la simulación. Finalmente, en el *postprocesado*, se analizan y visualizan los resultados mediante gráficos de contorno y campos vectoriales, proporcionando una comprensión profunda del comportamiento del sistema (Sadino *et al.*, 2018).

Un ejemplo destacado de la aplicación de simulación física, se encuentra en el estudio de Wu (2012), que investigó el consumo energético de diferentes tipos de agitadores en un reactor de digestión anaerobia de mezcla completa con alta concentración de sólidos. Ese estudio demostró que el juego de de



<https://emaningenieria.com/que-son-biocombustibles-y-para-que-se-utilizan/>

dos impulsores axiales con aletas dobladas a 39° logra una mezcla más eficiente con el menor consumo energético, comparado con otros impulsores helicoidales y radiales. El desempeño de la distribución de velocidades, se muestra en la Figura 2.

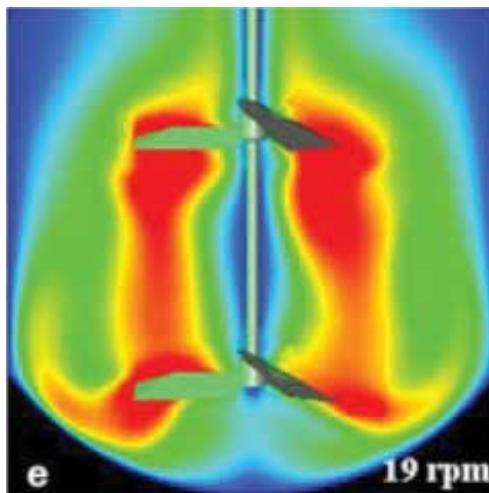


Figura 2

Resultado de la simulación física en el digestor anaerobio de mezcla completa. Tomado de: Wu, 2012.

4. Aportes del Laboratorio de Tecnología Anaerobia del TESE

Los trabajos realizados en el LTA Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, en donde se utilizan herramientas computacionales, han permitido explorar la digestión anaerobia de diferentes sustratos y ambientes. Algunos de los estudios incluyen la simulación de la estabilización de lodos residuales secundarios pretratados termoquímicamente empleando el modelo ADM1, realizando la simulación del proceso y su validación; algunas de las conclusiones interesantes para el trabajo cotidiano en el tópico, fueron, por ejemplo que, la concentración inicial de los distintos grupos microbianos es una variable sensible, pues modifica la concentración inicial de los intermediarios en la digestión anaerobia. La aplicación del modelo para calcular los cambios en la composición de la fracción biodegradable de los lodos, se vincula al conocimiento de las poblaciones microbianas al inicio del proceso de digestión. El amonio y el nitrógeno total, son dos parámetros que deben ser controlados desde la alimentación, ya que tienen un impacto sobre el pH y la inhibición de las etapas fermentativa y acetogénica (Ortega, 2009).

Otro trabajo realizado en el LTA, fue realizar la simulación de la producción de hidrógeno en un reactor de mezcla completa alimentado con lodos residuales secundarios (LRS). Para la elaboración del mismo, se utilizó el modelo de la digestión anaerobia ADM1. La digestión anaerobia metanogénica de LRS produce en promedio $0.21 \text{ mL H}_2 \cdot \text{g}^{-1} \text{SSV}$. Con la intención de aumentar la productividad de hidrógeno, se simuló tres estrategias de enriquecimiento del inóculo. En la primera, se añadió un microorganismo productor de hidrógeno (*Clostridium spp*) directamente al digestor anaerobio de lodos; con dicha estrategia, el rendimiento de hidrógeno se mantuvo en el mismo nivel. En la segunda estrategia, se inhibieron los grupos consumidores de azúcar (fermentación) y los consumidores de hidrógeno (metanogénesis

hidrogenotrófica) y se enriqueció el digestor con *Clostridium spp*; dicha estrategia mostró que los rendimientos de hidrógeno pueden llegar hasta 70 mL.g⁻¹SSV. En la tercera estrategia, se inhibieron además las bacterias metanogénicas acetoclasta, lo que incrementó la productividad del reactor hasta 170 mL H₂.g⁻¹SSV.

Otro análisis realizado por simulación, es la influencia del tiempo de retención de sólidos sobre la producción de hidrógeno. Para el digestor anaerobio sin enriquecimiento y con enriquecido, la simulación mostró que el tiempo de retención modifica la productividad, debido principalmente a que disminuye el rendimiento de desintegración e hidrólisis de los lodos. La aplicación correcta de la simulación del modelo de producción de hidrógeno permitió identificar la mejor estrategia de enriquecimiento para el arranque de digestores anaerobios de lodos con producción hidrógeno, o bien la conversión de digestores anaerobios de lodos residuales con producción de metano a digestores hidrogénicos (Hernández, 2012).

En general el uso de las herramientas computacionales ha permitido el estudio de las variables que más influyen en la productividad de la digestión anaerobia, empleando modelos de inhibición debido al pH (Magaña, 2024), del efecto de la temperatura (Villegas, 2013), multisustratos (Borjas, 2023), entre otros.

Actualmente, Sarmiento desarrolla su tesis de Maestría sobre el diseño de un sistema anaerobio-aerobio para el tratamiento conjunto de aguas residuales municipales y residuos de frutas y hortalizas, utilizando herramientas computacionales para dicho propósito. También trabajamos en proyectos de hidrodinámica de los reactores anaerobios utilizados en el LTA mediante el uso de CFD para su modelamiento y simulación. En general, como se ha dicho aquí, las herramientas computacionales son necesarias para el trabajo diario de investigación y desarrollo de tecnologías.

Conclusiones

El propósito de este artículo, ha sido ilustrar cómo las herramientas computacionales de simulación de procesos enriquecen y optimizan la aplicación de procesos de digestión anaerobia. A través de la discusión de tres enfoques principales -simulación modular, orientada a ecuaciones, y física-, hemos explorado sus respectivas características distintivas y su contribución al campo.

La simulación modular nos permite evaluar los procesos de manera integral, facilitando la comprensión de la operación del digestor, en conjunto con otras operaciones para mejorar el rendimiento global. Por otro lado, la simulación orientada a ecuaciones destaca por su capacidad para desentrañar el comportamiento dinámico de los procesos, lo que resulta crucial para el control de variables y la identificación de condiciones operativas óptimas. Finalmente, la simulación física arroja luz sobre los detalles del diseño geométrico de los sistemas, lo cual es fundamental para el perfeccionamiento de los dispositivos empleados en la digestión anaerobia.

Estas herramientas, aunque dirigidas a objetivos distintos, son pilares fundamentales en el avance hacia tecnologías de digestión anaerobia más eficientes. Además, demuestran que la digestión anaerobia no solo es viable, sino también una solución prometedora para el manejo y valorización de residuos líquidos y sólidos.

Referencias

Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S. V., Pavlostathis, S. G., Rozzi, A., Sanders, W. T. M., Siegrist, H., & Vavilin, V. A. (2002). "The IWA Anaerobic Digestion model No. 1 (ADM1)". *Water Science and Technology: A Journal of the International Association on Water Pollution Research*, 45(10), 65-73. <https://doi.org/10.2166/wst.2002.0292>

Borjas Rubio, Ana María (2023). Determinación de los parámetros cinéticos de un consorcio microbiano anaerobio. Tesis de Ingeniería Bioquímica, del Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec. Ecatepec de Morelos, Estado de México.

Ganeshan, P., & Rajendran, K. (2022). "Dynamic simulation and optimization of anaerobic digestion processes using MATLAB". *Bioresource Technology*, 351(126970), 126970. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2022.126970>

Harun, N., Othman, N. A., Zaki, N. A., Mat Rasul, N. A., Samah, R. A., & Hashim, H. (2019). "Simulation of anaerobic digestion for biogas production from food waste using SuperPro designer". *Materials Today: Proceedings*, 19, 1315-1320. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.11.143>

Hernández Gutiérrez, Jéssica Samanta (2012). Simulación de la producción de hidrógeno en un reactor de mezcla completa alimentado con lodos residuales secundarios. Tesis de Maestría en Ingeniería Bioquímica, del Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec. Ecatepec de Morelos, Estado de México.

Hill, D. T. (1983). "Simplified monod kinetics of methane fermentation of animal wastes". *Agricultural Wastes*, 5(1), 1-16. [https://doi.org/10.1016/0141-4607\(83\)90009-4](https://doi.org/10.1016/0141-4607(83)90009-4)

Magaña López, Carolina (2024). Inhibición de la metanogénesis por efecto del pH. Tesis en Ingeniería Química, del Tecnológico de Estudios

Este artículo también ha servido para destacar las investigaciones y desarrollos realizados en el Laboratorio de Tecnología Anaerobia del TESE, reconociendo la significativa contribución de sus alumnos y exalumnos en este ámbito. Así, extendemos una invitación a los ingenieros en formación para sumarse a estos esfuerzos, animándolos a participar en el desarrollo de proyectos de investigación que hagan uso de estas herramientas innovadoras.

Superiores de Ecatepec. Ecatepec de Morelos, Estado de México.

Ortega Nájera, Gabriel (2010). Validación del modelo ADM1 para la digestión anaerobia termofílica de lodos residuales. Tesis de Maestría en Ingeniería Química del Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec. Ecatepec de Morelos, Estado de México.

Sadino-Riquelme, C., Hayes, R. E., Jeison, D., & Donoso-Bravo, A. (2018). "Computational fluid dynamic (CFD) modelling in anaerobic digestion: General application and recent advances". *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 48(1), 39-76. <https://doi.org/10.1080/10643389.2018.1440853>

Villegas Durán, Itzel María (2013). Efecto de la temperatura sobre la velocidad de hidrólisis anaerobia de lodos residuales secundarios. Tesis de Ingeniería Bioquímica, del Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec. Ecatepec de Morelos, Estado de México.

Wu, B. (2012). "CFD simulation of mixing for high-solids anaerobic digestion". *Biotechnology and Bioengineering*, 109(8), 2116-2126. <https://doi.org/10.1002/bit.24482>

Fotografías

<https://procycla.cl/modelacion-y-simulacion-de-procesos/modelacion-de-la-digestion-anaerobia/>

<https://www.retema.es/articulos-reportajes/tecnologias-desarrolladas-en-el-marco-del-proyecto-novedarconsolider>