

FORMULACIÓN DE UN MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAR LA DIGESTIÓN ANAERÓBICA DE EFLUENTES ORGÁNICOS EN REACTORES UASB

Lucas Seghezzo y Luis Cardón
Universidad Nacional de Salta, Consejo de Investigación - INENCO
Buenos Aires 177, 4400 Salta, Argentina.
Tel.: 0387-4255516; Fax: 0387-4255483; Email: lucas@unsa.edu.ar, cardon@unsa.edu.ar

RESUMEN: En este trabajo se presenta la primera versión un programa de computación que resuelve un modelo matemático de la digestión anaeróbica de aguas residuales. La carga orgánica del efluente modelado proviene únicamente de los sólidos en suspensión. El efluente es tratado en un sistema de 2 reactores anaeróbicos de flujo ascendente y manto de lodos (reactores UASB) conectados en serie. El programa permite la simulación de la evolución de las variables dinámicas intervinientes. Este programa resulta a la vez un prototipo y un punto de partida para el desarrollo y simulación de modelos más complejos.

Palabras clave: Digestión anaeróbica, reactores UASB, simulación, modelo matemático.

INTRODUCCION

La mayoría de los modelos matemáticos de la digestión anaeróbica existentes se han limitado a la predicción de las condiciones de los procesos una vez alcanzado el llamado "estado estacionario" (Lawrence and McCarty, 1969; Chen and Hashimoto, 1978, 1980). Sin embargo, los procesos anaeróbicos son muy dinámicos, ya sea durante la puesta en marcha de los reactores, la operación normal, el mantenimiento diario, o en momentos de transición. El modelado dinámico de la fermentación anaeróbica de efluentes industriales y agroindustriales ha sido estudiado inicialmente por Andrews (1971), Graef y Andrews (1974) y Hill y Barth (1977). Un modelo matemático que sólo representa el estado estacionario no es útil para interpretar, por ejemplo, un sistema que se está desequilibrando. La complejidad de los procesos intervinientes en la digestión anaeróbica debe representarse por series de ecuaciones diferenciales no lineales para las cuales no existe solución analítica. Las simulaciones cuantitativas han sido siempre muy complicadas y requieren demasiados datos del sistema para realizar predicciones acertadas, ya que los procesos en juego comprenden elementos orgánicos e inorgánicos, fases líquidas, sólidas y gaseosas, y procesos físicos, químicos y biológicos que deben ser considerados de manera simultánea durante el modelado. Un modelo completo y exhaustivo de la digestión anaeróbica denominado "The IWA Anaerobic Digestion Model N°1 (ADM1)" está siendo elaborado por un grupo de trabajo de la IWA (International Water Association) (Batstone et al., 2001). Este modelo permitirá la estandarización de los modelos existentes y será un punto de partida para la formulación de modelos más específicos. Sin perder de vista sus limitaciones, un modelo matemático puede ser una herramienta importante para entender la cinética de los procesos intervinientes y para desarrollar y poner en práctica sistemas racionales para el diseño y control de plantas de tratamiento de efluentes (Chen et al., 1988).

PARÁMETROS Y PROCESOS INTERVINIENTES EN UN REACTOR ANAERÓBICO

Temperatura

La temperatura afecta directamente la velocidad de las reacciones biológicas, influenciando la actividad metabólica de los microorganismos intervinientes. A su vez, tiene un efecto marcado sobre la velocidad de transferencia de gases y sobre la sedimentación de algunos sólidos biológicos. La eficiencia de los procesos anaeróbicos son altamente dependientes de la temperatura del reactor (van Haandel and Lettinga, 1994; Bogte et al., 1993). El rango óptimo para la digestión anaeróbica denominada "mesofílica" se ubica entre 30 y 40°C. La temperatura afecta no sólo la velocidad del proceso, sino también el nivel alcanzable de degradación, o biodegradabilidad final. A bajas temperaturas, más materia orgánica permanece sin degradar debido a que la hidrólisis de sólidos volátiles es demasiado lenta. Sin embargo, si esos sólidos son retenidos en el reactor, separados de la fase líquida, pueden ser degradados en un digestor adicional o en el mismo reactor cuando la temperatura sube nuevamente (Bogte et al., 1993).

pH

El valor y la estabilidad del pH en un reactor anaeróbico es extremadamente importante porque la metanogénesis sólo se lleva a cabo cuando el pH se mantiene cerca de la neutralidad (6.3 a 7.8). Cuando se tratan líquidos cloacales en reactores anaeróbicos, el pH está generalmente en el rango óptimo sin necesidad del agregado de productos químicos, debido a la acción del sistema buffer carbonato-bicarbonato, el sistema ácido-base más importante en un digestor anaeróbico (van Haandel y Lettinga, 1994).

Retención de partículas por adhesión, intercepción y sedimentación

Los efluentes orgánicos pueden contener cantidades significativas de material coloidal y particulado, además de las sustancias disueltas. Los procesos aceptados de retención de partículas en sistemas de tratamiento biológico basados en bio-películas (biofilms) son: a) *Transporte* (desde el líquido hasta la superficie del biofilm), b) *Intercepción* (colisión de las partículas con el biofilm) y c) *Sedimentación* (debido a la fuerza de gravedad, siguiendo la ley de Stokes).

Mezclado

En un reactor anaeróbico de flujo ascendente y manto de lodo, o reactor UASB (Figura 1, izquierda), el comportamiento hidrodinámico y el modelo de mezclado del lodo son interdependientes e influyen el rendimiento del proceso (Heertjes y van der Meer, 1978). La velocidad ascensional, el ascenso de las burbujas de biogas y la distribución del influente en la base del reactor son los principales factores que influyen el flujo del líquido y el modelo de mezclado. Este modelo puede ser determinado mediante técnicas de estímulo-respuesta, realizando ensayos de distribución del tiempo de residencia con trazadores inertes (Murphy, 1971). Los reactores UASB pueden ser considerados como divididos en tres compartimientos: 1) el lecho de lodos, 2) el líquido sobrenadante, y 3) el sedimentador. Los dos primeros se consideran completamente mezclados, mientras que el último se toma como un sector de flujo pistón (Bolle et al., 1986). Cortocircuitos, flujos de retorno y espacios muertos pueden ser considerados para describir el sistema con más precisión (Heertjes and van der Meer, 1978).

CINÉTICA DE LA DIGESTIÓN ANAERÓBICA

El paso limitante

Se considera que el paso o proceso limitante durante la digestión anaeróbica de un efluente orgánico que contiene una considerable cantidad de material particulado (como un líquido cloacal) es la hidrólisis (Pavlostathis y Giraldo-Gómez, 1991), proceso por el cual sustancias poliméricas no disueltas son convertidas en monómeros o dímeros disueltos. La hidrólisis depende de la temperatura del proceso, el tiempo de retención hidráulica, la composición del sustrato (porcentaje de lignina, carbohidratos, proteínas y grasas), el tamaño de partículas, el pH, la concentración de NH_4^+ y la concentración de los productos de la hidrólisis (ácidos grasos volátiles) (Speece, 1983). La hidrólisis puede ser descrita por una cinética de primer orden (Pavlostathis y Gossett, 1985; Pavlostathis y Giraldo-Gómez, 1991):

$$V_s \frac{dF}{dt} = Q \cdot (F_0 - F) - K_h \cdot F$$

donde F = concentración de sustrato degradable no disuelto (kg/m^3); t = tiempo, medido en d = días; K_h = constante de hidrólisis (d^{-1}); V_s = volumen de reactor (m^3); Q = caudal de líquido influente (m^3/d). La hidrólisis se efectúa a través de exoenzimas excretadas por bacterias fermentativas.

Crecimiento, muerte, rendimiento y actividad

Cuando existe suficiente sustrato y nutrientes, la tasa neta de crecimiento de microorganismos puede ser descrita por una simple ecuación autocatalítica corregida por un factor que representa la tasa de muerte de microorganismos, siguiendo una cinética de primer orden:

$$r_x = \frac{dX}{dt} = (\mu - K_d) \cdot X$$

donde r_x = velocidad de crecimiento de microorganismos ($\text{kg}/\text{m}^3 \cdot d$); X = concentración de microorganismos (kg/m^3); μ = tasa específica de crecimiento de los microorganismos (d^{-1}), t = tiempo (d), y K_d = tasa de muerte celular (d^{-1}). El coeficiente de rendimiento Y es la biomasa (microorganismos) X que se produce por unidad de sustrato S , y puede ser expresada como $\text{kg}_{\text{microorganismos}}/\text{kg}_{\text{sustrato}}$.

$$Y = \frac{r_x}{r_s}$$

donde $r_s = dS/dt$ es la tasa de consumo de sustrato. También puede decirse que $r_s = \frac{\mu \cdot X}{Y}$,

donde el cociente entre μ e Y es la actividad específica de los microorganismos, expresada como $\text{kgDQO}/\text{kgSSV} \cdot d$; DQO = Demanda Química de Oxígeno; SSV = Sólidos Suspendingos Volátiles.

El modelo cinético de Monod

Monod (1950) propuso que la tasa de crecimiento depende no sólo de la concentración de microorganismos, sino también de la concentración de sustrato. Describió esta relación con una función hiperbólica similar a la propuesta por Michaelis-Menten para la interacción enzima-sustrato:

$$\mu = \mu_{\max} \cdot \frac{S}{K_s + S}$$

con μ_{\max} = tasa máxima de crecimiento de microorganismos (d^{-1}); S = concentración de sustrato ($kgDQO/m^3$) y K_s = constante de Monod, también llamada constante de saturación media ($kgDQO/m^3$). Se acepta actualmente que la conversión de sustratos solubles durante la digestión anaeróbica se rige por la ecuación de Monod (Pavlostathis y Giraldo-Gómez, 1991; van Haandel y Lettinga, 1994).

BALANCES DE MASA

Los balances de masa sobre los microorganismos, el sustrato, los productos, o cualquier otro componente del sistema, son muy útiles para el cálculo de parámetros en estado estacionario (cuando no existe acumulación de ningún tipo en el sistema). En un Tanque Agitado Continuo (TAC), los balances de masa para microorganismos y para sustrato están representados por las siguientes ecuaciones, respectivamente:

$$V \frac{dX}{dt} = QX_0 - QX + r_x V, \quad y \quad V \frac{dS}{dt} = QS_0 - QS - r_s V$$

donde V = volumen del reactor (m^3); Q = caudal (m^3/d); r_x = tasa de producción de biomasa ($kgSSV/m^3 \cdot d$) y S ($kgDQO/m^3$) y X ($kgSSV/m^3$) son la concentración de sustrato y biomasa, respectivamente, con el subíndice θ indicando las condiciones iniciales. Sin biomasa en el influente ($X_0 = 0$) y $r_x = \mu X$, las velocidades de cambio de la concentración de bacterias y sustrato vienen dadas por las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - \frac{X}{\theta}, \quad y \quad \frac{dS}{dt} = \frac{S_0 - S}{\theta} - r_s$$

donde $\theta = V/Q$ es el Tiempo de Retención Hidráulica (TRH) (d). En estado estacionario se puede demostrar que

$$\mu = \frac{1}{\theta}, \quad y \quad r_s = \frac{S_0 - S}{\theta}$$

Si reemplazamos μ con la expresión de Monod obtenemos la concentración de sustrato en estado estacionario como

$$S = \frac{K_s}{\mu_{\max} \theta - 1}$$

La concentración de microorganismos vendrá dada por

$$X = Y(S_0 - S)$$

Se puede ver que, en estado estacionario, la tasa específica de crecimiento es igual a la inversa del tiempo de retención de sólidos, el cual es un parámetro operativo muy importante en los sistemas biológicos de tratamiento de efluentes (Chen y Hashimoto, 1980). Otros modelos han sido propuestos para la digestión anaeróbica, muchos de ellos basados en el de Monod (Contois, 1959; Pirt, 1965; Andrews, 1971; Chen y Hashimoto, 1980; Beffink et al., 1990, entre otros).

EL SISTEMA EN ESTUDIO

Suposiciones

1. El sistema consiste en dos reactores idénticos. En el primer reactor tiene lugar la hidrólisis de material particulado mientras que en el segundo se produce la acidogénesis y metanogénesis de los compuestos solubles producidos durante la hidrólisis.
2. Se considera que cada reactor es un TAC (Figura 1, derecha).
3. La temperatura de operación es $30^\circ C$ (óptima).
4. Toda la DQO del influente proviene de material particulado (no hay materia orgánica soluble en el influente).
5. Todas las partículas son esferas con el mismo diámetro. La forma de las partículas es importante cuando se considera una cinética de hidrólisis basada en la superficie, que no es el caso del presente trabajo, en el cual la hidrólisis se considera un proceso con cinética de primer orden.
6. Las partículas son 100% biodegradables.
7. La única materia orgánica soluble que llega al segundo reactor se produce por hidrólisis en el primer reactor.
8. Acidogénesis y metanogénesis son consideradas como un solo proceso comandado por la cinética de Monod.

Parámetros necesarios

Algunos de los parámetros necesarios para correr el modelo se presentan en la Tabla 1. La operación del sistema a escala piloto será monitoreada a través de mediciones regulares de diversos parámetros y variables, tales como caudal, temperatura, DQO total, DQO filtrada (filtro 4.4 μm), DQO soluble (membrana 0.45 μm), DBO₅²⁰, ácidos grasos volátiles, alcalinidad, sólidos, Nutrientes (N, P, S), carbohidratos, lípidos, proteínas, actividad hidrolítica, acidogénica y metanogénica, entre otros, y en frecuencia a determinar.

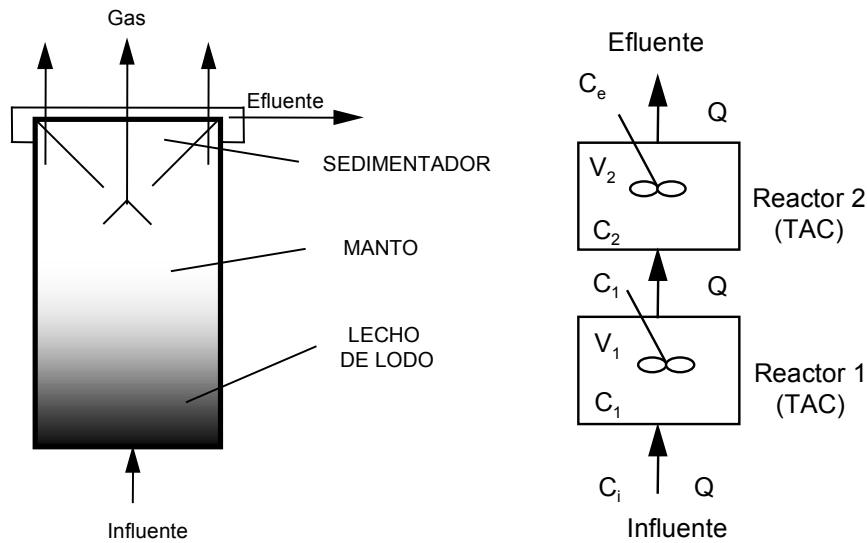


Figura 1. Esquema de un reactor UASB (izquierda). Modelo hidráulico simplificado utilizado (derecha), para dos reactores UASB en serie, cada uno considerado como un TAC (Tanque Agitado Continuo). C = concentración; V = volumen; Q = caudal; i = influente; e = efluente.

$V_1 = 10.0$
$V_2 = 1.0$
$Q = \text{Variable}$
$0 < t < 200 = 0.01$
$200 < t < 400 = 0.03$
$400 < t < 600 = 0.01$
$600 < t < 800 = 0.03$
$800 < t < 1500 = 0.01$
$K_h = 0.03$
$\mu = \text{Variable}$
$\mu_{max} = 0.2$
$K_s = 0.5$
$Y = 0.03$
$F(t = 0) = 0.05$
$F_0 = 1.0$
$S(t = 0) = 0.5$
$S_0 = 0.0$
$X(t = 0) = 0.005$
$X_0 = F_0 - F$

Tabla 1. Parámetros necesarios para definir el modelo matemático de la corrida mostrada en la Figura 2.

EL PROGRAMA UASB v1.1

Se ha desarrollado el programa **UASB v1.1** para la integración temporal de las ecuaciones que describen el modelo matemático, cuya interfase se muestra en la Figura 2. El programa fue desarrollado en *Qbasic* en su versión original y en *Visual Basic* en la presente y constituye un prototipo que resuelve la mayoría de las funciones básicas necesarias para la simulación de modelos de reactores biológicos de mayor complejidad que el aquí presentado. En la versión **v1.1** se ha usado programación estructurada, mientras que en la versión **v1.2** bajo desarrollo se usará programación orientada a objetos. En la Figura 2 se presenta la interfase gráfica del programa, que muestra la evolución temporal de las concentraciones de las variables relevantes de los dos reactores. Estos representan mínimamente una planta de tratamiento de líquidos cloacales. En el primer reactor se realiza la fase de hidrólisis mientras que en el segundo tiene lugar la transformación biológica de los productos de la hidrólisis. El modelo hidráulico es muy sencillo y todo lo producido en el primer reactor pasa al segundo. En cada una de las gráficas mostradas en el panel de la interfase se muestra la evolución de la concentración de sustrato particulado en el reactor 1, y las concentraciones de sustrato y microorganismos en el reactor 2. Los parámetros utilizados se

dan en la Tabla 1. Se ha supuesto un caudal variable con el tiempo dado en la misma tabla, al sólo efecto de mostrar una simulación más interesante. Nótese que la concentración de microorganismos (panel central en *Figura 2*) se mantiene relativamente constante a pesar de las variaciones de caudal y los efectos combinados del crecimiento bacteriano y el arrastre por lavado.

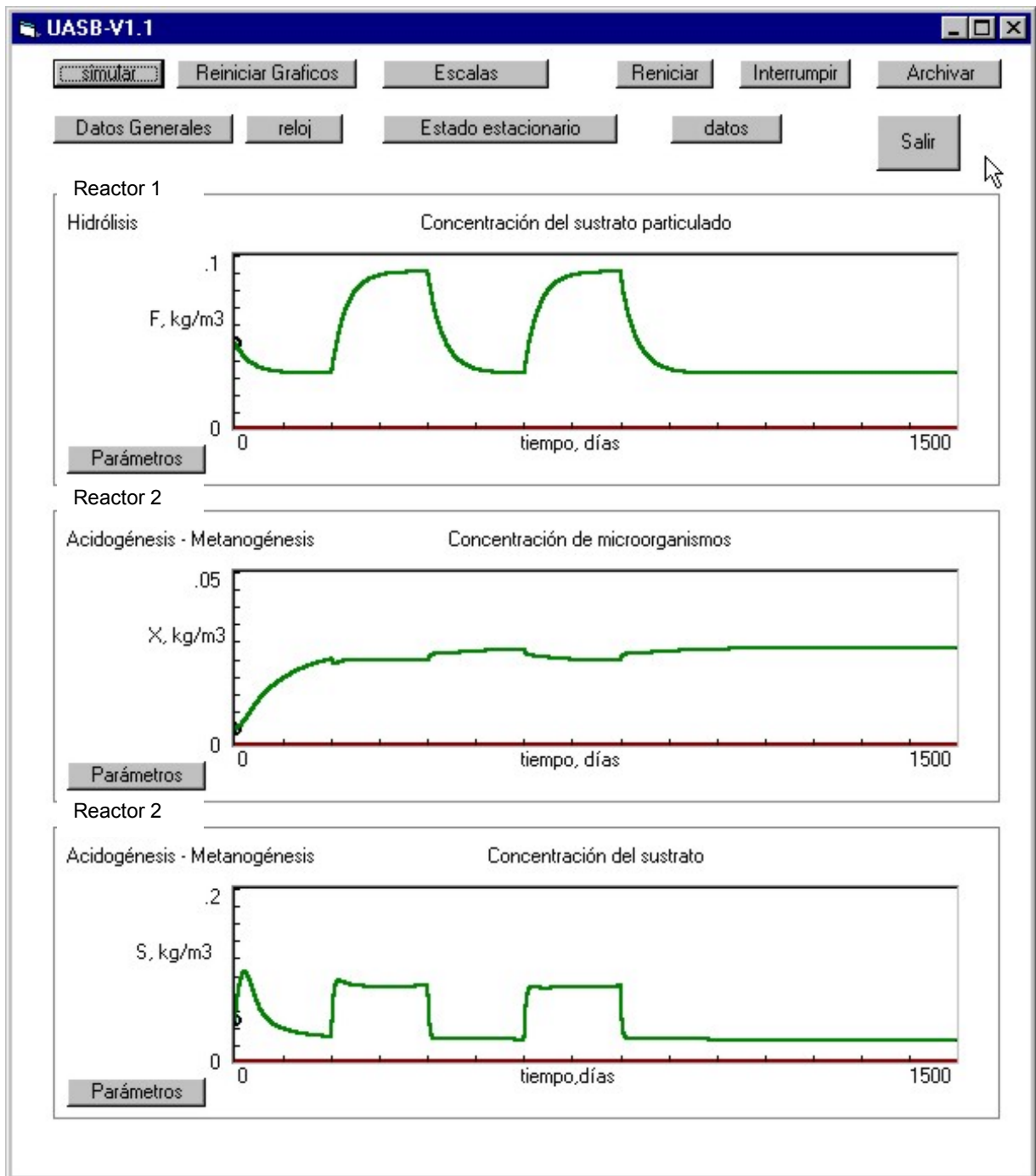


Figura 2. Interfase del programa UASB v1.1.

CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un programa prototípico para la simulación de sistemas de tratamiento de líquidos cloacales mediante reactores UASB. El programa puede modificarse para incluir sistemas más complejos, otros procesos físicos, químicos y biológicos, o distintos modelos cinéticos. Permite la predicción del comportamiento de estos sistemas bajo distintas condiciones de caudal, carga orgánica, temperatura, etc.. Este programa se está usando como base para el desarrollo de un programa con la misma funcionalidad basado en programación orientada a objetos. En una segunda etapa se compatibilizará el modelo presentado con el ADM1 y se iniciará la validación con datos de funcionamiento de reactores UASB en escala piloto.

REFERENCIAS

- Andrews, J.F. (1971). *Kinetic models of biological waste treatment processes*. Biotechnol. and Bioeng. Symp. 2:5-33.
- Batstone, D.J., Keller, J., Angelidakis, R.I., Kalyuzhny, S.V., Pavlostathis, S.G., Rozzi, A., Sanders, W.T.M., Siegrist, H., y Vavilin, V.A. (2001). *The IWA Anaerobic Digestion Model N°1 (ADM1)*. Actas Noveno Congreso Mundial de Digestión Anaeróbica (Workshop and late papers). Amberes, Bélgica, 2 al 6 de septiembre de 2001. 8 p.
- Beeftink, H.H., van der Heijden, R.T.J.M. y Heijnen, J.J. (1990). *Maintenance requirements: energy supply from simultaneous endogenous respiration and substrate consumption*. FEMS Microbiology Ecology 73:203-210.
- Bogte, J.J., Breure, A.M., van Andel, J.G. & Lettinga, G. (1993). Anaerobic treatment of domestic wastewater in small scale UASB reactors. *Wat.Sci.Tech.* 27(9):75-82.
- Bolle, E.L., van Breugel J., van Eybergen, G.C., Kossen, N.W.F. y van Gils W. (1986). *An integral dynamic model for the UASB reactor*. Biotechnology and Bioengineering 28:1621-1636.
- Chen, Y.R. y Hashimoto, A.G. (1978). *Kinetics of methane fermentation*. Biotechnology and Bioengineering Symposium 8:269-282.
- Chen, Y.R., Chen, T.H. y Hashimoto, A.G. (1988). *Modeling anaerobic batch-fermentation of glucose to methane*. Transactions of the ASAE 31(6):1855-1859.
- Chen, Y.R. y Hashimoto, A.G. (1980). *Substrate utilization kinetic model for biological treatment processes*. Biotechnology and Bioengineering 22:2081-2095.
- Contois, D.E. (1959). *Kinetics of bacterial growth: relationship between population density and specific growth rate of continuous cultures*. J. Gen. Microbiol. 2140-50.
- Graef, S.P. y Andrews, J.F. (1974). *Stability and control of anaerobic digestion*. Journal WPCF 46(4):667-683.
- van Haandel, A.C. y Lettinga, G. (1994). *Anaerobic sewage treatment. A practical guide for regions with a hot climate*. Chichester, England. John Wiley & Sons Ltd. 226 p.
- Heertjes, P.M. y van der Meer, R.R. (1978). *Dynamics of liquid flow in an up-flow reactor used for anaerobic treatment of wastewater*. Biotechnology and Bioengineering 20:1577-1594.
- Hill, D.T. y Barth, C.L. (1977). *A dynamic model for simulation of animal waste digestion*. Journal WPCF Octubre:2129-2143.
- Lawrence, A.W. y McCarty, P.L. (1969). *Kinetics of methane fermentation in anaerobic treatment*. Journal WPCF 41(2):R1-R17.
- Meer, R.R. van der y Heertjes, P.M. (1983). *Mathematical description of anaerobic treatment of wastewater in upflow reactors*. Biotechnology and Bioengineering 25(11):2531-2556.
- Monod, J. 1950. *La technique de culture continue. Théorie et applications*. Annales de l'Institut Pasteur 79(4):390-410.
- Murphy, K.L. (1971). *Significance of flow patterns and mixing in biological waste treatment*. Biotechnol. and Bioeng. Symp. 2:35-50.
- Pavlostathis, S.G. y Gossett, J.M. (1985). *A kinetic model for anaerobic digestion of biological sludge*. Biotechnology and Bioengineering 28:1519-1530.
- Pavlostathis, S.G. y Giraldo-Gómez, E. (1991). *Kinetics of anaerobic treatment: a critical review*. Critical Reviews in Environmental Control 21(5,6)411-490.
- Pirt, S.J. (1965). *The maintenance energy of bacteria in growing cultures*. Proc. R. Soc. Lond., Ser. B. 163:224-231.

ABSTRACT

In this work, a program to simulate a mathematical model for the anaerobic digestion of organic wastewater in a system of two UASB reactors in series is presented. The program allows the simulation of the temporal evolution of the dynamic variables. The program is both a prototype and a starting point for the development and simulation of more complex models.

Keywords: Anaerobic digestion, UASB reactors, simulation, mathematical model.