Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana

Azcapotzalco

SIMULACIÓN RIGUROSA DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA

PRESENTA:

ARTURO PALLARES GARCÍA

ASESORES:

Director de tesis:

Dr. Héctor Fernando Puebla Núñez

Departamento de Energía, UAM-Azcapotzalco.

Co-director de tesis:

Dr. Mauricio Sales Cruz

Departamento de Bioquímica, UAM-Cuajimalpa

Octubre de 2014

Agradecimientos

Como objetivo fundamental al terminar un posgrado, conlleva a la adquisición de nuevos conocimientos por los retos que se superan a lo largo de 2 dos años de perseverancia, esfuerzo, estudio y dedicación. Por ello quiero agradecerme haber experimentado esta etapa de mi vida, que hoy queda atrás y se vuelve un pasado con experiencias y conocimientos gratos, que serán recordados con enorme gozo.

Primeramente quiero dar mi enorme agradecimiento a mi madre quien ha sido mi guía y la parte medular del apoyo que siempre he necesitado. Deseándole que durante su viaje de permanencia en esta tierra, se le permita fuerza, coraje e inteligencia para realizar sus objetivos propios de sus convicciones. A mí familia por ayudarme y alentarme a continuar en esta vereda del conocimiento. Por su cariño, comprensión y apoyo incondicional.

Posteriormente agradezco a mis directores de tesis. Al Dr. Héctor F. Puebla Núñez quien me ha brindado su ayuda y apoyo en los momentos críticos de este trabajo; así como las expectativas depositadas en mí. Él ha corregido minuciosamente este trabajo y me ha permitido mejorarlo, confiando en las pocas destrezas que de mí surgen. Agradezco sus excepcionales comentarios, sugerencias y correcciones con las que he podido elaborar una adecuada memoria, de todo el trabajo realizado durante un año. A continuación agradezco al Dr. Mauricio Sales Cruz por su gran calidad científica y humana, me abrió la puerta a este mundo apasionante. Le agradezco sinceramente su confianza, comentarios, sugerencias y, sobre todo el apoyo en mis momentos oscuros en el planteamiento y caminos a seguir en este trabajo. También agradecerle por apoyar la estancia en la Universidad Técnica de Dinamarca. Gracias a ellos he asistido a congresos, cursos y talleres que me han permitido dar un buen seguimiento a esta tesis.

Ahora, quiero agradecer la colaboración del Dr. Hugo Méndez Acosta, del Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería en Guadalajara, Jalisco; por su paciente ayuda en la comprensión del proceso de la digestión anaerobia, mediante previas citas y visitas realizadas dentro de su planta piloto para el tratamiento de las vinazas del Tequila. También quiero resaltar el apoyo, las sugerencias y la geometría proporcionada para el mejoramiento e implementación de un análisis CFD, de un digestor anaerobio.

También agradezco la colaboración del Dr. Jorge Ramírez Muños y al Ing. Rubén Ramírez, ambos de la UAM-Azcapotzalco por los ensayos CFD realizados. Sus comentarios científicos, por contestar a muchas dudas y cuestiones. Las consultas,

revisiones y cursos del Dr. Jorge fueron clave fundamental en el desarrollo de este trabajo. Les agradezco la bibliografía que me proporcionaron y sobre todo, su amistad.

Por último, agradezco el apoyo económico recibido por CONACyT en este periodo de maestría y la beca mixta para realizar la estancia en Technical University of Denmark (DTU).

Dejo de nombrar algunas personas que me brindaron su valiosa ayuda. Les agradezco a todos ellos, para que este trabajo saliera adelante de la mejor manera posible.

Contenido

Resumen	11
<i>Resumen</i>	13
1.1 MOTIVACION	13
1.2 ESTADO DEL ARTE	15
1.3 HIPOTESIS	17
1.4 OBJETIVOS	18
1.4.1. Objetivo general	18
1.4.2. Objetivos particulares	18
1.5 ESTRUCTURA DE LA TESIS	18
<i>Resumen</i>	20
2.1 ETAPAS DE LA DA	20
2.1.1. Hidrólisis	21
2.1.2. Acidogénesis	22
2.1.3. Acetogénesis	22
2.1.4. Metanogénesis	23
2.2 DIGESTORES ANAEROBIOS	23
2.2.1 Biorreactor continuo de tanque agitado mecánicamente	24
2.2.2 Biorreactor de Lecho Fijo (BLF)	26
2.2.3 Biorreactor Cama de Lodos (ASB)	26
2.3 PARAMETROS Y VARIABLES DE LA DA	27
2.3.1. Parámetros ambientales y de operación	27
i. Composición del agua de desecho	27
ii. Temperatura	28
iii. Régimen de agitación	28
iv. Macro y micronutrientes	29
v. pH y alcalinidad	29
vi. Efectos de la presión sobre la digestión anaeróbica	29
vii. Concentración de microorganismos	30
2.3.2. Variables de control	30
i. Tiempo de retención hidráulico (TRH)	30
ii. Carga volumétrica aplicada (CVA)	30
2.3.3. Inhibición	30
i. Luz	31
ii. Amonio	31
iii. Lignocelulosa y lignina	31
iv. Compuestos de Azufre	31

v. Metales pesados _____	32
vi. Hidrógeno _____	32
vii. Ácidos grasos y aminoácidos _____	32
2.4 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DEL PROCESO DE DA _____	33
2.4 MODELADO Y SIMULACION DE LA DA _____	34
2.4.1. Modelo ADM1 de DA. _____	34
<i>Resumen</i> _____	38
3.1 INTRODUCCION A ASPEN PLUS _____	38
3.1.1. Desarrollo de diagramas de flujo.	39
3.1.2. Indicadores del estado de la simulación.	40
3.1.3. Selección de unidades de trabajo.....	40
3.1.4. Métodos de propiedades termodinámicas y fisicoquímicas.	40
3.1.5. Reacciones cinéticas de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) en Aspen Plus para reactores.....	42
3.1.5. Estequiometría de la reacción en Aspen Plus.	43
3.2 MODELO PSM PARA SIMULACION RIGUROSA DE LA DA _____	43
3.3 ESTRUCTURA E IMPLEMENTACION DEL MODELO PSM EN ASPEN PLUS _____	47
3.3.1. Inicio de Aspen Plus. _____	47
3.3.2. Diagrama de flujo. _____	47
3.3.3. Modelo termodinámico _____	52
3.3.4. Selección de unidades de trabajo _____	53
3.3.5. Componentes _____	53
3.3.6. Especificación de componentes que no están en la base de datos _____	54
3.3.7. Reacciones del modelo PSM. _____	55
3.3.8. Condiciones iniciales y datos de entrada _____	56
3.3.9. Bloques Fortran _____	57
3.3.10 Resultados para aplicaciones reportadas en la literatura _____	58
3.4 APLICACIÓN DEL MODELO PSM A TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES DEL TEQUILA (VINASAS) _____	61
<i>Resumen</i> _____	64
4.1 INTRODUCCION A LA DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL _____	64
4.2 DESCRIPCION Y GEOMETRIA DEL CASO DE ESTUDIO _____	66
4.3 MODEALDO DE FLUJO EN CFD _____	67
4.3.1. Consideraciones del modelo _____	68
4.3.2. Ecuaciones de continuidad y movimiento. _____	68
4.3.3. Modelo de turbulencia ($k-\varepsilon$) standard	69
4.3.4. Modelos RANS para tratamiento en la pared en ANSYS Fluent (Enhance Wall Treatment).....	70

4.4 SIMULACION POR CFD DE UN DIGESTOR ANAEROBIO TRATANDO VINAZAS DEL TEQUILA	71
4.4.1. Inicio de ANSYS Fluent.....	71
4.4.2. Geometría.....	73
4.4.3. Mallado.....	74
4.4.4. Inicio de la simulación.....	79
4.4.5. Selección de régimen de flujo.	82
4.4.6. Selección de fluido.	84
4.4.7. Condiciones de frontera y de contorno para la simulación.....	85
4.4.8. Corriendo la simulación.	90
4.4.9. Visualización de resultados.	93
4.5 RESULTADOS DE CFD	96
Resumen	98
5.1. CONCLUSIONES PRINCIPALES	98
5.2 LINEAS DE INVESTIGACION ABIERTAS	100

Figuras

Figura 2.1 Etapas de la digestión anaerobia (Batstone et al. ^[5]).	21
Figura 2.2 Biorreactor agitado mecánicamente.	25
Figura 2.3 Agitadores e impulsores utilizados en biorreactores. a) Turbina de disco Rushton; b) Turbina de palas cóncavas; c) Prochem Maxflo T hidropalano; d) Lightnin' A315 hidropalano; e) Chemineer hidropalano; y f) Propela marina.....	26
Figura 2.4 Etapas principales de la DA: (1) Acidogénesis a partir de azúcares, (2) Acidogénesis a partir de aminoácidos, (3) Acetogénesis de ácidos grasos de cadena larga (LCFA), (4) Acetogénesis de propionato, (5) Acetogénesis de butirato y valerato, (6) metanogénesis acetoclastica, y (7) la metanogénesis hidrogenotrófica (Batstone et al. ^[5]).	36
Figura 2.5 Esquema típico de un simple tanque digestor ($q = \text{flujo, m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$; $V = \text{Volumen, m}^3$; $SS_{\text{stream},j} = \text{Concentración de los componentes líquidos}$; $XS_{\text{stream},i} = \text{Concentración de los componentes particulados}$; todos en $\text{KgCOD} \cdot \text{m}^{-3}$, i es el componente indexado Batstone et al. ^[5]).	36
Figura 3.1 Iconos que muestran el estado de la simulación en Aspen Plus	40
Figura 3.2 Error de tolerancia en el balance de masa.	43
Figura 3.3 Diagrama de flujo del modelo de simulación de proceso (Rajendran et al. ^[32]).	44

Figura 3.4 Cuadro de diálogo para elegir una nueva o existente simulación.....	47
Figura 3.5 Diagrama de flujo del modelo PSM.....	48
Figura 3.6 Especificaciones de la corriente de entrada de material INPUT	48
Figura 3.7 Especificación de la información requerida para el Mixer (B2)	49
Figura 3.8 Resultados de la corriente Stream [6]	49
Figura 3.9 Especificación de las condiciones de operación y reacciones estequiométricas para el reactor Rstoic (B3)	50
Figura 3.10 Definición de la estequiometría.	50
Figura 3.11 Variables de estado y composición de flujo de materia en Stream [5] . ..	51
Figura 3.12 Especificación de las condiciones de operación y conjunto de reacciones en el reactor RCSTR (B1)	52
Figura 3.13 Configuración de las corrientes de salida de RCSTR (B1)	52
Figura 3.14 Modelo termodinámico NRTL usado en el modelo PSM.....	53
Figura 3.15 Lista de conjunto de unidades en cuadro de diálogo Units	53
Figura 3.16 Lista de componentes en Aspen Plus del modelo PSM.....	54
Figura 3.17 Especificación de componentes que no están en la base de datos de Aspen Plus	55
Figura 3.19 Bloques de cálculo en Aspen Plus incorporados al modelo PSM en código Fortran	58
Figura 3.20 Resumen de resultados para el caso 1.	59
Figura 3.21 Progreso de la simulación en el panel de control.....	59
Figura 4.1 Coexistencia de diferentes regímenes en un flujo.	65
Figura 4.2 Dimensiones del reactor anaerobio para el análisis CFD. Diagrama del reactor para el tratamiento de las vinazas de Tequila.....	67
Figura 4.3 Diagrama del digestor anaerobio para el tratamiento de las vinazas del Tequila dibujado en SolidWorks.	67
Figura 4.4 Selección del sistema de análisis en Workbench.....	71
Figura 4.5 Nuevo sistema de análisis Fluid Flow (Fluent) en Workbench.....	72
Figura 4.6 Selección de unidades en ANSYS DesignModeler	73
Figura 4.7 Geometría externa importada a ANSYS DesignModeler	74
Figura 4.8 Carga de la geometría en CFD Ansys Fluent	75
Figura 4.9 Geometría cargada en ANSYS Meshing	75
Figura 4.10 Selección de los nombres en las caras del biorreactor.	76
Figura 4.11 Creando los nombres en las zonas de interés.	77
Figura 4.12 Cambios de parámetros del tamaño del mallado.....	78

Figura 4.13 Control de tamaño de malla. (a) Control de mallado con la herramienta Sinzing , (b) Celda donde introducimos el valor deseado.....	78
Figura 4.14 Malla computacional de la geometría del reactor en ANSYS Meshing.....	79
Figura 4.15 FLUENT Launcher	80
Figura 4.16 Aplicación ANSYS Fluent	80
Figura 4.17 Selección de parámetros generales.....	81
Figura 4.18 Cuadro de diálogo Set Units	81
Figura 4.19 Selección de los modelos que regirán la simulación.....	83
Figura 4.20 Fluidos y materiales llamados de la base de datos en Fluent	84
Figura 4.21 FLUENT Database Materials	85
Figura 4.22 Selección del tipo de fluido para los elementos que componen al reactor.85	
Figura 4.23 Designación al elemento el tipo de fluido que lo compone.	86
Figura 4.24 Condiciones de frontera.	86
Figura 4.25 Condición de frontera en la entrada de fluido al reactor.	87
Figura 4.26 Diagrama del reactor donde se expresan los valores de flujo másico.	88
Figura 4.27 Condición de frontera en la superficie del reactor. (Cambiar imagen de fluido Laminar)	89
Figura 4.28 Criterios de convergencia para las ecuaciones.	90
Figura 4.30 Datos iniciales para iniciar la solución.	91
Figura 4.31 Advertencias y sugerencias de ANSYS-Fluent antes de iniciar la solución.	91
Figura 4.32 Run Calculation	92
Figura 4.33 Residuales para la convergencia de la solución.....	93
Figura 4.34 Celda de solución actualizada.	93
Figura 4.35 Geometría del reactor cargada en CFD-Post	94
Figura 4.36 Detalles de las líneas de corrientes.....	94
Figura 4.37 Distribución de la velocidad a lo largo del reactor.	95
Figuras 4.40 Líneas de corrientes de velocidad en el reactor para diferentes relaciones de flujo másico recirculación/alimentación (a) 1:1, (b) 1:2, (c) 1:3, (d) 1:4, (e) 1:5, (f) 1:6.	97

Tablas

Tabla 2.1 Reacciones de la acidogénesis a partir de glucosa en pH neutro.....	22
Tabla 2.2 Reacciones de los ácidos propiónico y butírico en la acetogénesis	22

Tabla 2.3 Metanogénesis acetoclástica y metanogénesis hidrogenotrófica.	23
Tabla 2.4 Resumen de los rangos de temperatura en la digestión (Deublein et al. ^[13]).	28
Tabla 3.1 Reacciones que se llevan a cabo en las rutas metabólicas de la digestión anaerobia Rajendran et al. ^[32]	45
Tabla 3.2 Lista de reacciones de aminoácidos, acidogénicas, acetogénicas y metanogénicas con constantes cinéticas incluidos en PSM (Rajendran et al. ^[32]).	45
Tabla 3.3 Diferentes sustratos con su condición de procesamiento y la comparación de los resultados experimentales y los resultados obtenidos a partir de la estimulación..	61
Tabla 3.4 Caracterización de las vinazas de Tequila (Zarate, M. ^[50]).	62
Tabla 3.5 Condiciones de operación para la adquisición de datos experimentales (Zarate, M. ^[50]).....	62
Tabla 4.1 Valores de flujo másico recirculación/alimentación en el biorreactor.	83
Tabla 4.2 Propiedades físicas del Agua. Fundamentos de momento, calor y masa. J., Welty. Apendice 1. Pag. 845. Ed. LIMUSA.	84
Tabla 4.3 Porcentajes de ponderación de flujo para las fronteras de salida.....	89

Abreviaturas y símbolos

Abreviaturas	Descripción
ADM1	Anaerobic Digestion Model 1.
AGV's	Ácidos Grasos Volátiles.
AM2	Modelo de digestión anaerobia #2 (siglas en inglés).
ANSYS, Inc.	Swanson Analysis Systems, Inc.
BCL	Biorreactor Cama de Lodos.
BLF	Biorreactor de Lecho Fijo.
CAD	Computer Aided Design (Diseño Asistido por Ordenador).
CFD	Dinámica de Fluidos Computacionales.
CPVC	Policloruro de Vinilo Clorado.
CUCEI	Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería.
CVA	Carga Volumétrica Aplicada.
DA	Digestión Anaerobia.
DBO	Demanda Bioquímica de Oxígeno.
DNS	Direct Numerical Simulation.
DQO	Demanda Química de Oxígeno.
3-D	3-Dimensiones.
ENG	Unidades de Ingeniería Inglés.
FA	Filtros Anaerobios.
IWA	International Water Association.
LCFA	Long Chain Fatty Acids.
LES	Large Eddy Simulation.
MET	Unidades de Ingeniería Métrico.
NRTL	Non-Random Two-Liquid model.
OLR	Organic Loading Rate
pH	Potencial de Hidrógeno.

PSM	Process Simulation Model.
RANS	Reynolds-averaged Navier-Stokes equations.
RCSTR	Continuous-Stirred Tank Reactor.
RCTA	Reactor Continuo de Tanque Agitado.
RStoic	Stoichiometric Reactor.
SI	Unidades del Sistema internacional.
SS	Sólidos Suspendidos.
SST	Sólidos Suspendidos Totales.
ST	Sólidos Totales.
SV	Sólidos Volátiles.
TRH	Tiempo de Retención Hidráulico.
UASB	Upflow Anaerobic Sludge Blanket.
VCO	Velocidad de Carga Orgánica.

Símbolos	Descripción
ρ	Densidad del fluido.
v_i	Velocidad del fluido en forma de tensor.
P	Presión estática.
τ_{ij}	Tensor de esfuerzos cortantes.
ρF_j	Fuerza gravitacional en la dirección i .
μ	Viscosidad molecular.
k	Energía cinética turbulenta.
ε	Tasa de disipación.
G_k y G_b	Generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad y flotabilidad.
σ_k y σ_ε	Números turbulentos de Prandtl.
μ_t	Viscosidad turbulenta.

SIMULACIÓN RIGUROSA DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA

Resumen

La digestión anaerobia (DA) es uno de los procesos biológicos de mayor uso para el tratamiento de aguas residuales con alta carga orgánica, las cuales son muy comunes en desechos agro-industriales. Un atractivo de la DA es la generación como subproducto de biogás (mezcla de metano y dióxido de carbono). A pesar de estas ventajas, se sigue desconfiando en este proceso, pues es potencialmente inestable y los tiempos de tratamiento pueden ser muy largos. Por esto, las plantas suelen estar sobredimensionadas, los costos de instalación son demasiado altos y su operación sea poco eficiente. Los procesos biológicos implican interacciones entre una gran cantidad de diversos tipos de microorganismos y sustratos contenidos en la materia orgánica, que dificulta contar con un entendimiento profundo de cómo funcionan y operan los procesos de DA y el efecto de diversas variables de operación de las unidades de tratamiento biológico de la DA. En este trabajo de tesis se presentan dos estudios de simulación rigurosa de procesos de DA. La simulación rigurosa permite modelar y simular con un alto grado de precisión los fenómenos más relevantes de un proceso y tienen la finalidad de mejorar el entendimiento de la DA, así como reproducir y predecir el comportamiento de esta clase de proceso. La simulación de procesos se lleva a cabo utilizando el simulador de procesos comercial Aspen Plus y el modelado y la simulación de los patrones de flujo por medio de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Para el caso de la simulación rigurosa con Aspen Plus, se describe la implementación de la DA reportada recientemente en la literatura y se identifican el potencial de su aplicación en otros casos de estudio. La simulación por CFD se lleva a cabo a través del programa ANSYS Fluent. Se considera un caso de estudio de un digestor anaerobio sin agitación de flujo ascendente empleado para el tratamiento de aguas residuales de alta resistencia de la industria tequilera.

TRABAJOS DERIVADOS DE ESTA TESIS

Derivado de los resultados que aquí se presentan se desarrollaron los siguientes trabajos:

1. Pallares-García, A., Ramírez-Muñoz, J., Puebla, H., Sales-Cruz, M., Mendez-Acosta, H.O. (2014). Computational fluid dynamics in CSTR type digesters for anaerobic digestion of tequila vinasses. 21th International Congress of Chemical and Process Engineering (CHISA 2014), Praga, Republica Checa, 23-27 Agosto 2014.
2. Puebla, H., Pallares-García, A., Mora-Vazquez, A., Sales-Cruz, M., Hernandez-Martínez, E., Mendez-Acosta, H.O. (2014). Process Engineering of Anaerobic Digestion of Tequila Vinasses. International Conference on Dynamical Systems and Mathematical Biology (ICDSMB 2014), Kolkata, India, 16-21 Noviembre 2014.

Otro trabajo que estuve involucrado indirectamente de esta tesis:

1. Martínez-de Jesús, G., Pallares-García, A., Robles-Padilla, G., Ramírez-Gómez, R., Rodríguez-Pérez, H., Ramírez-Muñoz, J., González-Brambila M., García-Cortés, D. Comparación de la Eficiencia de Mezclado entre impulsores convencionales de paletas inclinadas e impulsores de alta eficiencia en tanques agitados mecánicamente. XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C. (AMIDIQ). Puerto Vallarta, Jalisco México, Mayo 6-9, 2014

CAPÍTULO 1

Introducción

Resumen

En este capítulo se establece la motivación del estudio de la simulación rigurosa de la DA. Posteriormente, se presenta una revisión general del estado del arte relacionado a la simulación rigurosa de la DA. Una vez que se identifica la problemática se establecen la hipótesis y objetivos de este trabajo. Finalmente se proporciona un bosquejo de la organización de este trabajo.

1.1 MOTIVACION

La rápida industrialización ha dado lugar a la generación de una gran cantidad de efluentes con alto contenido orgánico que generan un problema ambiental importante. Debido a las restricciones ambientales cada vez más estrictas, existe una preocupación por desarrollar e implementar sistemas de tratamiento de aguas residuales. Dentro de las diversas posibilidades para el tratamiento de aguas residuales, los métodos biológicos son bastante atractivos por su bajo consumo de energía y bajas emisiones de CO₂ en comparación con otras técnicas. En particular con la DA se pueden procesar aguas residuales con altas cargas orgánicas, reducir olores y generar en forma lateral energía a través de la producción de biogás (mezcla compuesta principalmente por Metano y Dióxido de Carbono). Se ha considerado que el metano puede utilizarse para diferentes propósitos, tales como calentamiento, cocción y la posibilidad de producción de electricidad. Así, a pesar del hecho de que hay un impacto ambiental negativo asociado con la industrialización, el efecto puede ser minimizado y la energía puede ser aprovechada por medio de la DA de las aguas residuales (Ramírez et al. ^[34], Rajeshwari et al. ^[33]).

La AD es un proceso de múltiples etapas que incluye varios pasos bioquímicos y fisicoquímicos encontrados (Boubaker et al. ^[9]). Varios grupos de bacterias y arqueas trabajan en sinergia para descomponer sustratos complejos (carbohidratos, lípidos, proteínas, azúcares, aminoácidos, ácidos grasos de cadena larga (LCFA), ácidos grasos volátiles (AGV's), cationes y aniones) para formar metano (CH₄) y dióxido de carbono (CO₂). El biogás se obtiene después de cuatro etapas cruciales, incluyendo la hidrólisis, la acidogénesis, la acetogénesis y la metanogénesis. En la primera etapa, los sustratos

complejos tales como carbohidratos, grasas, y proteínas se hidrolizan en sus respectivos monómeros, tales como glucosa, ácidos grasos y aminoácidos. En segundo lugar, los monómeros hidrolizados se convierten en diferentes ácidos grasos volátiles (AGV's), tales como ácido valérico, ácido iso-valérico, ácido butírico, ácido iso-butírico, ácido propiónico y ácido acético. En la tercera etapa (acetogénesis), los AGV's se convierten en ácido acético, hidrógeno y dióxido de carbono. Por último, los metanógenos convierten productos de la acetogénesis en metano y dióxido de carbono (Mata-Álvarez ^[23]).

A pesar de sus claras ventajas, la aplicación de sistemas de DA es sensible a las perturbaciones y pueden sufrir inestabilidad. Esta inestabilidad se ve afectada generalmente como una caída en la velocidad de producción de metano, un aumento en el pH y/o en la concentración de ácidos grasos volátiles (VFA), lo cual lleva a la inestabilidad del digestor (Ramírez et al. ^[34]). Por otro lado, la producción de biogás, se ve afectada por varios factores tales como la tasa de carga orgánica (OLR), tiempo de retención hidráulica (TRH), la relación carbono-nitrógeno, pH, amoníaco, velocidad de crecimiento específico de microorganismos, la temperatura, y el contenido de mezcla. El estudio de estos factores, además de las reacciones metabólicas bacterianas implicadas en la DA, se complica en estudios experimentales. Sin embargo, estos factores y el metabolismo intermediario en AD podrían ser interpretados con la ayuda de modelos y simuladores capaces de predecir un comportamiento para este proceso (Rajendran et al. ^[32]).

Una mejora en la eficiencia de la DA se puede llevar a cabo modificando adecuadamente el diseño digestor existente o mediante la incorporación de técnicas avanzadas de funcionamiento apropiadas en biorreactores. Por ejemplo, un reactor de flujo pistón o un reactor de flujo ascendente, son los reactores más empleados debido a las bajas concentraciones de VFA que se obtienen en el efluente, un alto grado de retención de lodos y un rendimiento estable del reactor (Rajeshwari et al. ^[33]).

Conforme se apliquen los principios de bioquímica y biología, y se entiendan mejor las mezclas de cultivos, se pueden obtener mejoras significativas en los sistemas de tratamiento biológicos. No obstante, a pesar de que existen muchos estudios experimentales y teóricos sobre los sistemas anaerobios de tratamiento de aguas residuales, dichos procesos aún son un tema de estudio abierto y representan un área de interés para el manejo de aguas residuales en forma eficiente. Las simulaciones de procesos son bien apreciados por la industria y los investigadores, ya que pueden prever un escenario real con alta precisión, y los costos para llevar a cabo

las simulaciones de tales procesos resultan ser mucho más baratos que llevarlos a cabo experimentalmente.

En este trabajo se presenta la simulación rigurosa de procesos de DA a través del uso de dos herramientas de simulación de procesos: el simulador de procesos **Aspen Plus** y dinámica de fluidos computacional por medio de **ANSYS Fluent**. Por una parte, **Aspen Plus** puede ser muy útil para diseñar mejores plantas e incrementar la producción en plantas existentes, se pueden cambiar especificaciones, tales como la configuración del diagrama de flujo, condiciones de operación y composición de la alimentación, para correr nuevos casos, analizar alternativas y para analizar los resultados, se puede generar gráficas, reportes y archivos extendidos. Por otro lado, el modelado y simulación a través de CFD ha demostrado ser una herramienta importante para modelar, simular y predecir patrones de flujo en procesos complejos y puede ser útil para identificar problemas de transporte y mezclado que disminuyen la eficiencia del proceso. En el caso particular de biorreactores, se ha demostrado que una buena agitación mejora la eficiencia global de la remoción de materia orgánica y existe un mayor contacto de las bacterias con el sustrato, dando como resultado un incremento en la biomasa bacteriana para la remoción de los materiales orgánicos a tratar en los digestores anaerobios.

1.2 ESTADO DEL ARTE

En la literatura existen muchas contribuciones relacionadas a la DA. Sin embargo, pocas de ellas abordan la simulación rigurosa. En esta sección se presenta una revisión general de la literatura sobre la DA que tiene relación al tema de estudio de este trabajo.

Alt-Markov et al.^[1], estudiaron algunos modelos básicos clásicos para la simulación del biorreactor por lotes. Propusieron dos modelos teniendo en cuenta las fases de crecimiento microbiano. Algunas propiedades de estos dos modelos se estudiaron y se compararon con los modelos clásicos de tipo Monod utilizando simulaciones en la computadora. Galíndez-Ruiz et al.^[16] Comentan que las condiciones en biorreactores a veces se vuelven desfavorables, el crecimiento microbiano puede inhibirse y los procesos biotecnológicos pueden salir de control; por ello surge la necesidad de implementar un sistema riguroso de simulación para este proceso, así como también presentar a la simulación como una herramienta importante para la ayuda de toma de decisiones en el diseño, condiciones de operación y optimización de bioprocesos. Méndez-Acosta et al.^[27] realizaron un análisis fractal de series de tiempo

de las fluctuaciones de pH en un (AnSBR) para el tratamiento de las vinazas del tequila. Observaron que las mediciones de pH pueden correlacionar con variables como DQO y producción de biogás. Flores-Mejía et al. ^[14] realizaron un estudio preliminar de la optimización dinámica y control en tiempo finito de un digestor anaerobio de lote secuencial (AnSBR) para el tratamiento de vinazas tequileras, a fin de maximizar la degradación de materia orgánica en un tiempo finito.

Con relación a la simulación rigurosa de bioprocesos, la literatura científica es escasa. Ojeda-Ávila et al ^[31], analizaron el uso del bagazo de caña azúcar, para la producción de biocombustibles mediante el análisis económico y del ciclo de vida del bagazo utilizando **Aspen Plus**. Otras contribuciones sobre el uso de simulación rigurosa en procesos industriales son las siguientes. Sahu-Krishna et al. ^[39] simularon un proceso continuo para producción de amoníaco, así como el efecto de la temperatura y presión, mediante el uso de **Aspen Plus**. También realizaron estudios de CFD para simular la hidrólisis de urea para la síntesis de amoníaco. Rudniak et al. ^[38] desarrollaron un método para prevenir eventos fuera de control en reactores químicos discontinuos. Ellos usaron CFD para detectar la zona de puntos calientes en la mezcla de reacción, en dos sistemas de reacción exotérmicos, homogénea y heterogénea. Kumar et al. ^[20] presentaron la simulación de una unidad de destilación de crudo, utilizando **Aspen plus**. La unidad de destilación de crudo constituía una torre flash, una unidad de destilación atmosférica y una unidad de destilación al vacío.

Un simulador interactivo del proceso de digestión anaerobia fue desarrollado por Blesgen et al. ^[8]. Se basa en cuatro submodelos que interactúan describiendo, la biología, la fisicoquímica, el reactor, y subsistemas de la planta en el proceso global. El simulador fue adaptado para simular un reactor a escala de laboratorio 10 L de tres diferentes sustratos bien definidos, así como diferentes mezclas de estos compuestos. Debido a su configuración estructurada, el simulador se puede adaptar a otros tipos de plantas de biogás con respecto a la configuración de la planta, volumen del reactor y la composición del sustrato. Sin embargo, otros parámetros del proceso, tales como velocidad del influente, TRH y la termodinámica de las reacciones que afectan la producción de biogás no se investigaron en los modelos.

Monteith et al. ^[29] discuten algunas ventajas de los DA perfectamente mezclado, tales como mantener una temperatura uniforme en todo el volumen, evitar el depósito de sólidos y la formación de escoria en la parte superior, dispersar los gases tóxicos y productos finales al afluente, además de mantener un íntimo contacto entre el sustrato con las bacterias y las enzimas de las bacterias, lo cual proporciona

una máxima digestión llevada a cabo por las bacterias anaerobias. En su estudio de mencionan que una mezclado ineficiente puede reducir el volumen eficaz de un digestor al 70%, dejando un volumen efectivo real del 30%. La principal desventaja en este tipo de digestores es la energía extra y la complejidad mecánica asociada con el impulsor o la bomba, como ejemplo de este tipo de digestores son de recirculación de gas o lodo líquido y agitación mecánica.

Los patrones de flujo son complejos en cualquier tipo de mezcla, debido a la interacción de fases, la turbulencia y las propiedades del fluido Newtoniano o No-Newtoniano. Bello-Mendoza et al. ^[6] implementaron un modelo matemático que describe el comportamiento dinámico para investigar los efectos del mezclado en la digestión anaerobia. Las simulaciones muestran que un mezclado incompleto resultó en una menor generación de metano y en la eficiencia en el tratamiento de los residuos, y si extiende el tiempo de retención hidráulico y el grado de mezclado se eficiente la eliminación de la demanda química de oxígeno. Vesvikar et al. ^[44] llevaron a cabo simulaciones 3-D en estado estacionario mediante dinámica de fluidos computacionales (CFD) en digestores anaerobios para imitar y visualizar los patrones de flujo y parámetros hidrodinámicos. Sus resultados en CFD mostraron buena comparación con los datos experimentales en los patrones de flujo, la ubicación de las zonas muertas y las tendencias en los perfiles de velocidad. Para la obtención de los datos experimentales usaron un programa automatizado de partículas radiactivas de rastreo (CARPT). Wu et al. ^[47] desarrollaron un modelo matemático de un fluido No-Newtoniano que predice los campos de flujo de un digestor anaerobio de estiércol, además de simular estos por medio de CFD.

1.3 HIPOTESIS

Las hipótesis de las que se parte en este trabajo de maestría, son dos:

1. La simulación rigurosa es una herramienta útil para entender los factores que afecta la operación de un bioproceso y mejorar el comportamiento del mismo.
2. Los simuladores de proceso se pueden aplicar para estudiar la DA y mejorar el entendimiento del proceso.
3. El modelado y simulación de patrones de flujo, utilizando CFD, es útil para entender y mejorar el desempeño de procesos de DA.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo general.

Realizar la simulación rigurosa de DA a partir del uso de un simulador de procesos y de la dinámica de fluidos computacionales con la finalidad de mejorar el entendimiento de su comportamiento.

1.4.2. Objetivos particulares.

1. Estudiar la operación y aplicación de DA para el tratamiento de efluentes agroindustriales.
2. Realizar un estudio de la simulación rigurosa de procesos de DA aplicando el uso del simulador de procesos comercial **Aspen Plus**.
3. Realizar un estudio preliminar de la DA a través de CFD usando el software **ANSYS Fluent**.
4. Establecer las bases para realizar la simulación rigurosa de procesos de DA.

1.5 ESTRUCTURA DE LA TESIS

En esta investigación se presenta la simulación rigurosa del caso de estudio en dos niveles: (i) a través de la aplicación del simulador de procesos **Aspen Plus** para la simulación rigurosa del proceso incluyendo equipos laterales, y (ii) a través de la aplicación de dinámica de fluidos computacionales (CFD) se realizara un estudio preliminar de los patrones de flujo dentro del DA.

La tesis está estructurada de la siguiente forma:

- ❑ Capítulo 1. Se establece la problemática a estudiar, la simulación rigurosa de la DA, con la finalidad de mejorar el entendimiento de esta clase de procesos. Documentación bibliográfica del estado del arte relacionada a la simulación rigurosa de procesos de DA. Se plantean las hipótesis de partida y los objetivos, y por último un breve contenido sobre la estructura de este trabajo.
- ❑ Capítulo 2. Se presenta una descripción general de la DA, la cual incluye una explicación de las rutas metabólicas que subyacen en los procesos que ocurren en la DA. Se identifican además los parámetros y condiciones de operación que afectan o incrementan la eficiencia en la DA, así como las ventajas y

desventajas que implica optar por esta tecnología. Por último se presenta una breve reseña de los modelos de la DA, resaltando el modelo ADM1, que es la base de la mayoría de modelos reportados en la literatura en los últimos años sobre la DA.

- ❑ Capítulo 3. Se describe la aplicación del simulador de procesos **Aspen Plus** a la DA. Este capítulo se basa en los resultados que se reportaron recientemente sobre la simulación rigurosa de la DA por medio de **Aspen Plus**. Primero se presenta una breve introducción de **Aspen Plus** como un simulador de procesos. Después se especifica el modelo termodinámico empleado para las simulaciones de los casos de estudio, así como los conjuntos de reacciones, parámetros y las cinéticas bioquímicas que se consideran. Después de esto, se establecen los pasos para extender la simulación de procesos por **Aspen Plus** a otras aplicaciones.
- ❑ Capítulo 4. Se presenta el estudio preliminar de CFD mediante el software **ANSYS Fluent**. Se considera como caso de estudio un biorreactor empleado para la digestión anaerobia de las vinazas de Tequila. En primer lugar, se describe el caso de estudio. A continuación existe una breve introducción al flujo turbulento y se presenta la configuración geometría del digestor de nuestro caso de estudio en el software **SolidWorks**. Enseguida, se hace una pequeña reseña del modelo de turbulencia κ - ϵ ; el cual se implementara en la simulación CFD. Incorporamos las restricciones a la que sometemos la simulación de mezclado en el biorreactor. Posteriormente extendemos un tutorial sobre la implementación de la simulación CFD en **ANSYS Fluent**; el cual es, un seguimiento de toda la secuencia llevada a cabo para realizar la simulación. Después de esto, se presentan los resultados y la discusión de la simulación CFD que se deriven de la visualización de los resultados en **CFD-Post**. Al final exponemos nuestras conclusiones derivadas de la visualización de los patrones de flujo simulados en el digestor anaerobio.
- ❑ Capítulo 5. Finalmente, se cierra este trabajo con las conclusiones generales y perspectivas a futuro.

CAPÍTULO 2

Digestión Anaerobia de Procesos Agroindustriales

Resumen

En este capítulo se presenta una descripción general de la DA, incluyendo aspectos básicos como las etapas principales, tipos de digestores anaerobios, parámetros y variables clave, así como las ventajas y desventajas que implica optar por esta tecnología. Se presenta además una breve discusión de las consideraciones del modelo ADM1, que es la base de la mayoría de modelos reportados en la literatura en los últimos años sobre la DA.

2.1 ETAPAS DE LA DA

La Digestión Anaerobia (DA), son grupos de bacterias y arqueas que trabajan en sinergia, las cuales llevan a cabo complejas reacciones que degradan sustratos complejos orgánicos provenientes de aguas agroindustriales a productos como: metano y dióxido de carbono. El biogás se obtiene hasta la etapa final de las reacciones que se dividen comúnmente en cuatro grupos tróficos: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. Las ventajas de la DA son evidentes: formación de subproductos útiles como el biogás y muy baja producción de lodos. En la **Figura 2-1** se esquematizan los pasos de la DA. En la DA más del 90% de la energía disponible se transforma en metano, consumiéndose sólo un 10% de la energía en crecimiento bacteriano frente al 50% en un sistema aerobio (Muñoz-Valero et al. ^[30]).

Figura 2.1 Etapas de la digestión anaerobia (Batstone et al. ^[5]).

2.1.1. Hidrólisis.

Se refiere al grupo de reacciones que degradan la materia orgánica compleja, que consiste en carbohidratos complejos, proteínas y lípidos, los cuales se hidrolizan a monómeros solubles que pueden atravesar la membrana celular de las enzimas. La hidrólisis es la primera etapa para la degradación de sustratos orgánicos complejos, obteniendo como productos: aminoácidos disueltos, azúcares (glucosa), ácidos grasos de cadena larga y materia orgánica inerte.

La etapa de hidrólisis se divide en hidrólisis biológica, química y física. La hidrólisis biológica ocurre cuando las bacterias fermentativas excretan enzimas tales como la lipasa, proteasa y sucrasa, y atacan al sustrato. La hidrólisis química se debe normalmente a la acción de ácidos o bases débiles, que pueden ser añadidas al proceso para aumentar su tasa de reacción. En cuanto a la hidrólisis física, se puede dar por la desintegración mecánica de la materia orgánica, ultrasonido o tratamiento térmico.

2.1.2. Acidogénesis.

Es la fermentación de los azúcares disueltos, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga a ácidos grasos volátiles de cadena corta (ácido butírico, propiónico, fórmico, iso-butírico, acético) por las bacterias anaerobias facultativas, alcoholes y cetonas (metanol, etanol, glicerol, acetona) dióxido de carbono e hidrógeno. Este proceso es energéticamente favorable para los microorganismos. Estas conversiones pueden ser llevadas a cabo por diferentes rutas bioquímicas, como la fermentación y la b-oxidación. Los ácidos, acético y propiónico son los principales intermediarios de esta etapa, con el acético en mayor proporción (ver [Tabla 2.1](#)). Los productos de esta etapa dependen de las condiciones del medio (temperatura, pH, potencial redox, concentración de materia orgánica y micronutrientes).

Tabla 2.1 Reacciones de la acidogénesis a partir de glucosa en pH neutro

$C_6H_{12}O_6 + 2H_2O$	$\rightarrow$	$2CH_3COOH + 2CO_2 + 4H_2 + 4ATP$
$C_6H_{12}O_6 + 2H_2$	$\rightarrow$	$2CH_3CH_2COOH + 2H_2O + 2ATP$
$C_6H_{12}O_6$	$\rightarrow$	$2CH_3CH_2CH_2COOH + 2CO_2 + 2H_2 + 2ATP$

2.1.3. Acetogénesis.

Los ácidos grasos volátiles (AGV) son oxidados por arqueas anaeróbicas a hidrógeno, ácido acético y dióxido de carbono para que puedan ser consumidos por las bacterias metanogénicas. Los organismos acetógenos pueden ser inhibidos fácilmente por factores como pH, amoníaco, etc., haciendo ésta una etapa limitante y potencialmente inestable, pues la acumulación de AGV es un signo de que el equilibrio microbiano en el digestor ha fallado. La concentración de hidrógeno disuelto es otro parámetro importante ligado también a la estabilidad, ya que determina el rendimiento energético de la reacción donde los AGV son degradados a acetato e hidrógeno y no debe acumularse. Un rango aceptable de presión parcial de hidrógeno para garantizar que las reacciones procedan es 0.01 y 1.01 kPa ([Gavala et al. ^{\[17\]}](#)). Las reacciones más representativas pueden verse en la [Tabla 2.2](#). El grupo de bacterias *Syntrophomonas* está involucrado en este paso.

Tabla 2.2 Reacciones de los ácidos propiónico y butírico en la acetogénesis

$CH_3CH_2COOH + 2H_2O$	$\rightarrow$	$CH_3COOH + 3H_2 + CO_2$
$CH_3CH_2CH_2COOH + 2H_2O$	$\rightarrow$	$2CH_3COOH + 2H_2$

La mayor parte de materia orgánica puede ser transformada en este paso, resultando en H_2 , CO_2 y CH_3COOH , aunque una parte significativa (aproximadamente 30 %) es transformada en otros ácidos grasos de cadena corta y alcoholes. Este porcentaje puede aumentar cuando el proceso no está operando de manera estable y una proporción de estos productos no está siendo consumido a la velocidad necesaria (Lizárraga-Palazuelos ^[22]). La acumulación de H_2 es prevenida por la metanogénesis, así como de otros grupos de bacterias acetogénicas.

2.1.4. Metanogénesis.

Para esta ruta metabólica se lleva a cabo por dos grupos de microorganismos: los metanógenos, acetotróficos y hidrogenotróficos. Los acetotróficos producen metano y dióxido de carbono a partir del ácido acético principalmente; mientras que los hidrogenotróficos producen metano a partir del hidrógeno y dióxido de carbono (ver Tabla 2.3).

Tabla 2.3 Metanogénesis acetoclástica y metanogénesis hidrogenotrófica.

CH_3COOH	$\rightarrow$	$CH_4 + CO_2$
$4H_2 + CO_2$	$\rightarrow$	$CH_4 + 2H_2O$

Este paso requiere de un pH cercano al neutro, de lo contrario la producción de gas se inhibe. La solubilidad del metano a las condiciones de operación termofílicas y a bajas presiones es despreciable; es decir, se expulsa del sistema al mismo tiempo que se produce.

2.2 DIGESTORES ANAEROBIOS

La DA se lleva a cabo en biorreactores de diferentes tipos y formas. Un biorreactor puede ser un tanque o un recipiente donde se lleva a cabo una o muchas reacciones bioquímicas, para convertir un sustrato o una materia prima en un producto deseado. La reacción se realiza por la acción de biocatalizadores; como enzimas, bacterias, levaduras, células animales y vegetales. El sustrato de partida puede ser una sustancia orgánica (glucosa, ácidos grasos) o inorgánica (CO_2) y también materia de composición compleja como el estiércol animal o las vinazas del tequila, entre otras más. El producto final de la conversión pueden ser biomasa, microorganismos y productos químicos deseados. La reacción general que ocurre en un biorreactor se resume como:

Los diseños de los biorreactores necesitan una adecuación para cubrir las necesidades a una gran diversidad de sustratos, productos y biocatalizadores, según sean los requisitos de los procesos de bioconversión.

Existen distintos tipos y configuraciones de reactores anaerobios. Cada configuración puede ser óptima para una aplicación específica, pero podría fallar en otra. El tipo de agua de desecho y la estrategia de operación deseada influye en la elección del tipo de reactor y en su diseño, pues no es lo mismo tratar residuos de ingenios, destilerías, papeleras, rastros, residuos municipales, etc. (Rajeshwari et al. [33]). Además, se pueden tratar residuos sólidos y líquidos mediante DA. En todas las configuraciones de reactores anaerobios es deseable satisfacer algunas condiciones que se derivan del lento crecimiento de la biomasa (Zaher [48]):

- Tiempos de retención altos para la biomasa.
- Suficiente área de contacto entre la biomasa y el agua de desecho.
- Mezclado adecuado para facilitar el transporte de sustancias.
- La biomasa debe estar suficientemente aclimatada al agua de desecho.
- Condiciones ambientales favorables para todos los grupos de microorganismos.

A continuación se presenta una breve reseña de algunas configuraciones en digestores anaerobios.

2.2.1 Biorreactor continuo de tanque agitado mecánicamente.

Este tipo de biorreactores se componen de un recipiente cilíndrico con un motor de eje central guiado que soporta uno o más agitadores (ver Figura 2.2). Diferentes tipos de agitadores se utilizan para diferentes aplicaciones (ver Figura 2.3). Estos están provistos por cuatro baffles (o deflectores) los cuales son colocados equidistantes alrededor de la periferia del tanque. Los baffles tienen la altura del recipiente de trabajo, evitando el vórtice y remolinos en el fluido. El ancho del baffle es 1/10 o 1/12 del diámetro del tanque. El espacio entre la pared del recipiente y el baffle es aproximadamente 1.5% del diámetro del tanque para evitar el estancamiento de líquido cerca de la pared. El número de impulsores utilizados dependen de la proporción de llenado y la altura del recipiente. El impulsor inferior se encuentra aproximadamente a 1/3 del diámetro del tanque por encima de la parte inferior del

tanque. Los impulsores adicionales están espaciados entre ellos con una distancia de 1.2 del diámetro del impulsor.

Figura 2.2 Biorreactor agitado mecánicamente.

Esta configuración es más común y fácil de operar para tratamientos anaerobios en aguas de desecho con altas cargas orgánicas. No se considera capaz de manejar altos flujos; ya que se requiere altos volúmenes del biorreactor. La alimentación a estos reactores es lenta, y por lo tanto la DA es lenta. Normalmente estos digestores cuentan con enchaquetado para operar a temperaturas entre 30 a 60 °C para favorecer el crecimiento de los microorganismos. Su capacidad de remoción de DQO es baja y los TRH son altos (en promedio 20 días).

Figura 2.3 Agitadores e impulsores utilizados en biorreactores. a) Turbina de disco Rushton; b) Turbina de palas cóncavas; c) Prochem Maxflo T hidropilano; d) Lightning A315 hidropilano; e) Chemineer hidropilano; y f) Propela marina.

2.2.2 Biorreactor de Lecho Fijo (BLF).

El desempeño del BLF depende de la retención de la biomasa en un material de empaque sólido inerte, estos pueden ser empaques sintéticos, grava, segmentos de bambú, etc. El tamaño y el peso de estos empaques son factores importantes, aunque su característica más importante es la capacidad de la superficie para fijar los conglomerados y biopelículas de bacterias, y la disponibilidad de huecos para evitar estancamientos o flujos preferenciales. La configuración más común consiste en alimentar el agua de desecho por la parte inferior del biorreactor y de flujo es ascendente mediante una alimentación en el fondo. Generalmente se recircula el efluente para diluir materiales orgánicos en alta concentración, diluir sustancias inhibitorias o regular el pH. Esta configuración es la mejor para aguas de desecho acidificadas como las vinazas de Tequila (Zárate, M. ^[49]).

2.2.3 Biorreactor Cama de Lodos (BCL).

Este biorreactor está basado en la formación de agregados de lodos que se sedimentan fácilmente (flóculos o gránulos) que dependen de las características de las aguas de desecho, las cargas orgánicas, TRH, y en la aplicación de un separador gas/lodos/líquido. Esta configuración es parecida al BLF, con la diferencia de que no hay un empaque o un medio para que se fijen los microorganismos, por lo que se

forman los gránulos debido a que están fluidizados por el flujo ascendente en el biorreactor (Guiot et al. ^[18]).

2.3 PARAMETROS Y VARIABLES DE LA DA

En todos los procesos existen variables de operación que deben ser controladas para obtener el resultado deseado y evitar que el proceso este fuera de control. Para el caso de los procesos biológicos éstas suelen variar de manera impredecible debido a que hay seres vivientes que cumplen ciclos de vida y su actividad metabólica no suele ser constante todo el tiempo. Los parámetros ambientales es otro factor con el cual se ven afectados los procesos biológicos, entre estos están: las condiciones meteorológicas en donde se encuentra el proceso y el desconocimiento de la composición del agua de desecho. A continuación se presentan algunos de los parámetros ambientales, las variables de monitoreo y control más comunes en los procesos de digestión anaerobia.

2.3.1. Parámetros ambientales y de operación.

La producción de biogás se ve afectada por varios factores tales como la velocidad de carga orgánica (VCO), tiempo de retención hidráulico, relación de carbono a nitrógeno, el pH, amoníaco, la temperatura, y el mezclado. Estudiando estos factores, además de las reacciones metabólicas bacterianas implicadas en la digestión anaeróbica o fermentación, se complica en estudios experimentales. Sin embargo, estos factores y el metabolismo intermediario en AD podrían ser interpretados con la ayuda de modelos.

i. Composición del agua de desecho

El contenido equilibrado de materia seca en las aguas de desecho es un factor importante en un proceso de digestión. Por un lado, el bajo contenido de materia seca en el sustrato significa que entra un exceso de agua, por lo que el proceso se hace menos económico. De lo contrario, si el contenido de materia seca es tan alta (superior a 30 %) el proceso funciona, pero no funciona económicamente por un contenido bajo de agua, lo cual retarda cualquier crecimiento celular, la transferencia de material se convierte en un factor limitante y la biomasa no puede ser bombeada o bien mezclada. Como una conclusión en el proceso de la digestión deberá existir materia seca entre un 12 % y 30 % como caso general (Deublein et al. ^[13]).

ii. Temperatura

En la operación de digestores anaerobios se identifica tres rangos de temperatura. Psicrófilo, temperaturas de 10 a 25 °C, lo cual es relativamente económico en la construcción y operación de la planta, porque no hay unidades de intercambio de calor que estén involucrados en el proceso. Sin embargo, las desventajas son las bajas velocidades de reacción que resulta en tiempos de residencia elevados y/o de gran volumen del digestor para una degradación eficiente (véase la [Tabla 2.4](#)). Mesófilo de 25-40 °C, es el más adecuado para operar el proceso, pues es más estable y menos sensible a inhibición por amoníaco. La mayoría de bacterias metanogénicas operan en este rango de temperaturas y el comúnmente usado. El rango mesófilo se tienen tasas más altas de conversión en comparación con el proceso psicrófilo y mejores balances energéticos. Temperaturas de más de 40 °C (termófilo) son críticas para las bacterias mesófilas, ya que pierden su actividad para la producción de biogás ([Deublein et al. ^{\[13\]}](#)).

Las bacterias patógenas mueren en el rango de temperaturas termófilas, lo cual conlleva a un proceso más seguro. Las desventajas son que tiene más difícil la puesta en marcha del proceso, existe un mayor consumo de energía de calentamiento y es difícil lograr las condiciones óptimas de crecimiento; porque también las inhibiciones se vuelven importantes.

Tabla 2.4 Resumen de los rangos de temperatura en la digestión ([Deublein et al. ^{\[13\]}](#)).

Proceso anaerobio	Temperatura de operación (°C)	Operación (días)	Crecimiento bacteriano y tasa de degradación	Tolerancia a la toxicidad.
Psicrófila	10-25	>50	Bajo	Alto
Mesófila	25-40	25-30	Media	Media
Termófila	40-65	10-15	Alta	Baja

iii. Régimen de agitación

Mantener un buen régimen de agitación asegura la suposición que la concentración es uniforme en el digestor anaerobio y, por lo tanto, que los balances de masa sean válidos, pues los TRH para las partículas serán uniformes. La agitación también ayuda a que la mayoría de la biomasa microbiana pueda tener contacto con el agua de desecho, previniendo las zonas de estancamiento o de sedimentación; así como homogenizar la temperatura y el sustrato que consumen los microorganismos. La agitación debe ser de un régimen tal que la biomasa microbiana no sea desprendida de los lechos en los que está fija.

iv. Macro y micronutrientes

Los macronutrientes son elementos esenciales que componen las células de los microorganismos (hidrógeno, nitrógeno, carbono, oxígeno, azufre, fósforo, potasio, calcio, magnesio y hierro). Normalmente los microorganismos anaerobios requieren estos elementos a concentraciones de 10^{-4} M. Los micronutrientes están en concentraciones menores a 10^{-4} M (por ejemplo: níquel y cobalto) que son necesarios para los metanógenos en pequeñas cantidades, pero en una concentración mayor a la indicada pueden perjudicar a los acidógenos y metanógenos. En general, la DA requiere de pocos nutrientes debido a la baja velocidad de crecimiento de la biomasa. La adición de micronutrientes puede acortar considerablemente los periodos de adaptación al sustrato a tratar (Satyawali et al. ^[40]).

v. Alcalinidad y pH

Uno de los parámetros más importantes para el crecimiento de biomasa microbiana es el pH, ya que las bacterias más importantes en la DA tienen una velocidad de crecimiento óptima a distintos pH. Estos rangos son:

- Hidrolíticas entre 7.2 y 7.4
- Acidogénicas entre 5.2 y 6.5
- Acetogénicas entre 6.0 y 7.0
- Metanogénicas entre 7.5 y 8.5

Con respecto a estos rangos, se sugieren operar en un rango de pH de 6.0 y 8.5 si se opera un digestor de una sola etapa, es decir, cerca de la neutralidad. Aunque en los sistemas de DA, el pH no es una variable sensible ya que normalmente tienen una capacidad de tampón alta (determinada por la alcalinidad), puede servir para indicar la acumulación de AGV's los cuales inhiben la metanogénesis (Zárate, M. ^[49]).

vi. Efectos de la presión sobre la digestión anaeróbica

La solubilidad de algunos compuestos en la fase líquida depende de la presión en el digestor anaerobio. Es importante saber que algunos de estos compuestos como dióxido de carbono o amoníaco tienen reacciones ácido-base que controlan el pH del digestor. El efecto de toxicidad de amoníaco o sulfuro de hidrogeno no ionizado se puede evitar. Por lo tanto un aumento en la presión, conlleva a la inhibición por

amoniaco, mientras, una disminución de la presión reduce la inhibición por sulfuro de hidrógeno libre (Vavilin et al. ^[43]).

vii. Concentración de microorganismos

Las bacterias hidrolíticas y la formación de ácidos tienen un tiempo de residencia corto en comparación con los microorganismos metanogénicos; los cuales tienen un tiempo de residencia entre 10 o 15 días en el digestor debido al bajo del crecimiento. Entonces, esto significa que la puesta en marcha de la planta de biogás requiere alrededor de 3 meses para dejar crecer suficientes bacterias metanogénicas, de lo contrario, la cantidad de lodos inoculados serán insuficientes para comenzar la operación de la planta de inmediato (Deublein et al. ^[13]).

2.3.2. Variables de control.

i. Tiempo de retención hidráulico (TRH)

Es el tiempo que el agua de desecho permanece en el biorreactor y está en contacto con la biomasa microbiana. El TRH está determinado por la carga orgánica en el agua de desecho a tratar, la carga orgánica deseada en el efluente, el volumen y la configuración del biorreactor. En términos del volumen del biorreactor (V) y el flujo volumétrico (F); el TRH se define como:

$$TRH = \frac{V}{F} \quad (2.1)$$

ii. Carga volumétrica aplicada (CVA)

Es la cantidad de materia orgánica que es introducida en un intervalo de tiempo por unidad de volumen. La DQO suele ser el mejor parámetro para expresar esta cantidad por su rápido cálculo, a diferencia de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO). Esta carga depende de la concentración del influente y del TRH.

2.3.3. Inhibición

El proceso de la DA es afectado por los cambios bruscos en el ambiente y por las inhibiciones como: pH, temperatura, velocidad de crecimiento de los microorganismos, amoniaco, hidrogeno, compuestos de azufre, metales, algunos compuestos orgánicos, entre otras; afectando a varios grupos tróficos.

La situación más extrema se le conoce como "lavado" (washout), que es la pérdida de la biomasa microbiana a una velocidad mayor que la de su crecimiento (Zárate, M. ^[49]). Las sustancias inhibitoras facilitan esta condición irreversible y es necesario inocular nuevamente el digestor anaerobio, una actividad delicada y lenta; pues es necesario aclimatar la biomasa nuevamente. Entre los inhibidores se tienen dos categorías: orgánicos e inorgánicos. A continuación se describen algunos inhibidores más comunes.

i. Luz

El proceso de la DA tiene que llevarse a cabo en la oscuridad, porque la luz inhibe la metanización (Deublein et al. ^[13]).

ii. Amonio

El gas de amonio está presente en aguas de desecho que contienen grandes cantidades de proteínas o aminoácidos. El nitrógeno orgánico es mineralizado a amonio en la DA. La toxicidad del amonio es debida a su forma desionizada (NH_3 libre) (Siegrist et al. ^[42]). A pH neutro la concentración de ($\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$) ronda el 1 %, pero al subir el pH a 8 su concentración sube 10 veces. Los parámetros como el pH y la temperatura determinan la cantidad de amoniaco liberado en el sistema, y la tasa de ionización de amoniaco afecta el proceso de la metanogénesis. Por otro lado, bajas concentraciones de amoníaco es beneficioso y necesario para las bacterias anaeróbicas debido a que utilizan nitrógeno como nutriente (Cheng, J. ^[12]).

iii. Lignocelulosa y lignina

Un alto contenido de compuestos ligno-celulósicos resulta en una baja biodegradabilidad. Estos compuestos se cree que son difícilmente biodegradables en la DA debido a que tienen una estructura compleja y rígida, resistente al ataque enzimático e insolubles en agua. Así que algunos científicos creen que la lignina es difícilmente biodegradable siendo sólo útil para producir calor al ser quemada (Bruni et al. ^[10]).

iv. Compuestos de Azufre

Los sulfatos reductores (sulfato, sulfuro de hidrógeno no disociado en el gas y líquido, y las formas disociadas HS^- , S^{2-}) son capaces de sobrepasar la población metanógena, debido a que hay una mayor ganancia energética en la sulfatorreducción en la

metanogénesis. Más aún, la reducción de sulfato a sulfuros o H_2S es tóxica para los metanógenos. La toxicidad se debe a su forma desionizada (Deublein et al. ^[13]).

v. Metales pesados

Los metales pesados se encuentran en solución como cationes y sales. La alta concentración de sales puede ser inhibitoria, ya que causa la deshidratación de las células microbianas debido a la presión osmótica. Los cationes responsables de la inhibición, comúnmente son sodio, potasio, calcio y magnesio, y metales pesados: Fe, Cu, Zn, Ni, Co, Mn, Cr, Cd y Pb. Aunque la mayoría de estos metales se requieren como micronutrientes para cultivo de microorganismos, en altos niveles pueden tener efectos inhibidores y/o tóxicos para las bacterias (Deublein et al. ^[13]).

Una concentración excesiva conduce a precipitar carbonato y fosfato, que causan la acumulación de sólidos inorgánicos insolubles en las tuberías. Sin embargo, el precipitado puede servir como un núcleo para las bacterias anaerobias para formar un biofilm; pero como consecuencia provoca limitaciones de transferencia de masa.

Los metales pesados (Cr, Fe, Co, Cu, Zn, Cd y Ni) no son metabolizados por los microorganismos; como resultado, se pueden acumular en concentraciones tóxicas potenciales, interrumpiendo la función de la enzima. Sin embargo, algunos pueden ser estimulantes para el crecimiento del microorganismo anaeróbico a baja concentración.

vi. Hidrógeno

El hidrógeno es el producto principal de la hidrólisis, acidogénesis, y acetogénesis. Es un intermedio importante de la DA, sin embargo, en altas concentraciones podrían darse inhibición de las reacciones acetogénicas cambiando algunas vías de la mismas (Cheng, Jay ^[12]).

La concentración de hidrógeno debe estar equilibrada, porque es necesario para la producción de metano; sin embargo, si hay mucho, las bacterias acetogénicas detienen su producción. Así que se necesita una buena simbiosis entre la bacteria acetogénicas que producen hidrógeno y sus consumidoras metanogénicas (Deublein et al. ^[13]).

vii. Ácidos grasos y aminoácidos

Estas sustancias normalmente están presentes en el sustrato. Existen en su forma disociada y no disociada, y se descomponen durante la metanización. El problema proviene de los ácidos no disociados porque penetran en la capa lipofílica de las

células, donde se desnaturalizan las proteínas de la célula. También, si la concentración de ácido orgánico es alta en el digestor, la inhibición ocurre por la caída del valor de pH. Las actividades metanogénicas pueden ser inhibidas o detenerse si el pH es inferior a 6, porque la producción de hidrógeno se produce en lugar de la producción de metano (Cheng, J. ^[12]).

2.4 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DEL PROCESO DE DA

Las ventajas y desventajas del proceso de la digestión anaerobia (Mejía et al. ^[24]), se enlistan las siguientes:

Ventajas:

- ☐ Muy poca producción de lodos.
- ☐ Recuperación de biogás.
- ☐ Capacidad de la biomasa para permanecer inactiva durante periodos relativamente prolongados y entrar en operación nuevamente con relativa facilidad.
- ☐ Bajo requerimiento de nutrientes.
- ☐ Operación a concentraciones de materia orgánica elevada.
- ☐ Nula producción de olores, ya que el sistema opera completamente cerrado.

Desventajas:

- ☐ Reacciones bioquímicas muy lentas.
- ☐ Tiempo requerido para el arranque de los sistemas muy largo.
- ☐ Susceptibilidad frente algunas condiciones ambientales.
- ☐ Tiempos de retención hidráulicos grandes.
- ☐ Competencia bacteriana.
- ☐ Alto gasto energético para mantener al biorreactor a temperaturas superior a la del ambiente.

Sin embargo, a pesar de las ventajas y desventajas que presenta la tecnología de la DA, se ha implementado con gran éxito para el tratamiento de distintos efluentes agroindustriales.

2.4 MODELADO Y SIMULACION DE LA DA

La operación tradicional de digestores anaerobios se puede mejorar a través del uso de modelos matemáticos y de la simulación del proceso. El modelado y simulación de procesos puede ser útil en los siguientes aspectos:

- Mejorar el entendimiento del proceso.
- Analizar diferentes escenarios de operación del proceso en forma preliminar a realizarlos en el proceso real.
- Validar y formular las suposiciones e hipótesis planteadas en la derivación del modelo.
- Abordar problemas de diseño, optimización y control de procesos.

Las desventajas del modelado y la simulación de procesos, conlleva a desarrollar un modelo para fines de un análisis riguroso del proceso. Como consecuencia del modelado puede ser largo, costoso, complicado y alto requerimiento de cómputo. Por lo tanto, muchas variables quedarán fuera del modelo y se hacen suposiciones ideales; lo cual puede representar una idea falsa del proceso real.

El uso de métodos matemáticos y simuladores de proceso para el análisis y evaluación de bioprocesos, ha tenido un aumento de interés por parte de los investigadores. La simulación de la digestión anaerobia, basada en modelos matemáticos, permite ahondar en la comprensión de fenómenos complejos; así como corroborar las hipótesis propuestas y visualizar las trayectorias descritas por el modelo bajo condiciones extremas o situaciones experimentalmente impracticables con resultados interesantes que conlleva a la modificación de las hipótesis originales.

Con los recientes desarrollos de modelos de la DA es posible realizar simulaciones que nos lleven a entender como operar de manera eficiente este proceso identificando factores que afectan el desempeño de los digestores anaerobios.

2.4.1. Modelo ADM1 de DA.

En la actualidad existe un gran número de modelos y dependiendo de la aplicación que se necesite se debe seleccionar el modelo adecuado. Puesto que los modelos contienen simplificaciones importantes, se debe tener cuidado en la validez de los parámetros a diferentes condiciones de operación, tipo de reactor y agua de desecho a tratar. La aplicación del modelo depende del grado de detalle incluido, pues puede servir para la simulación de una planta, estudiar la dinámica de fluidos, diseño de biorreactores, etc.

El modelo ADM1 es el más utilizado para la simulación de plantas y ha sido adaptado y validado para una gran cantidad de configuraciones de digestores anaerobios por lotes y continuo y una gran cantidad de sustratos, pero este modelo es demasiado complejo para ser utilizado con fines de simulación por la gran cantidad de variables con la que cuenta.

El modelo está dividido en cinco pasos fundamentales: desintegración, hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis (ver [Figura 2.4](#)). Los pasos de solubilización extracelular consisten en la desintegración e hidrólisis. La desintegración es un paso no biológico, donde la materia orgánica e inorgánica es transformada a material particular inerte, carbohidratos, proteínas y lípidos. La hidrólisis es un proceso enzimático en la que ocurren tres procesos en paralelo, convirtiendo carbohidratos, proteínas y lípidos en monosacáridos, aminoácidos y ácidos grasos de cadena larga respectivamente. Cabe mencionar, que la desintegración e hidrólisis, son procesos que se representan con una cinética de primer orden ([Batstone et al. ^{\[5\]}](#)). Dos grupos de bacterias acidogénicas degradan los monosacáridos y aminoácidos en ácidos orgánicos, hidrógeno y dióxido de carbono. Grupos de bacterias acetogénicas convierten los ácidos orgánicos (tales como ácidos grasos de cadena larga, butirato, valerato y propionato) a acetato, dióxido de carbono y de hidrógeno. En el último paso, el hidrógeno y el acetato son convertidos en una mezcla de metano y dióxido de carbono. El hidrógeno producido es convertido por bacterias metanogénicas hidrogenotróficas y el acetato por bacterias metanogénicas acetoclasticas.

Figura 2.4 Etapas principales de la DA: (1) Acidogénesis a partir de azúcares, (2) Acidogénesis a partir de aminoácidos, (3) Acetogénesis de ácidos grasos de cadena larga (LCFA), (4) Acetogénesis de propionato, (5) Acetogénesis de butirato y valerato, (6) metanogénesis acetoclastica, y (7) la metanogénesis hidrogenotrófica (Batstone et al.^[5]).

La información del modelo ADM1 para la aplicación a un reactor tanque agitado de flujo continuo, con un flujo de entrada y uno de salida, y volumen de líquido constante ($q_{out} = q_{in}$), véase la siguiente **Figura 2.5**.

Figura 2.5 Esquema típico de un simple tanque digestor ($q = \text{flujo}, m^3 \cdot d^{-1}$; $V = \text{Volumen}, m^3$; $S_{Stream,j} =$ Concentración de los componentes líquidos; $X_{Stream,i} =$ Concentración de los componentes particulados; todos en $KgCOD \cdot m^{-3}$, i es el componente indexado Batstone et al.^[5]).

El modelo ADM1 está estructurado con 32 variables de concentración en estado dinámico e implica 19 procesos bioquímicos promedios. El conjunto de ecuaciones diferenciales del modelo ADM1 son los siguientes:

- 10 Ecuaciones diferenciales para modelar la evolución de las concentraciones de sustancias solubles en la fase líquida.
- 2 Ecuaciones diferenciales para modelar el Carbono Inorgánico (CI) y niveles de Nitrógeno Inorgánico (NI) en la fase líquida.
- 12 Ecuaciones diferenciales para representar el comportamiento dinámico de las partículas de materia y la concentración de biomasa en la fase líquida.
- 2 Ecuaciones diferenciales para modelar los niveles de cationes y aniones en la fase líquida.
- 6 Ecuaciones diferenciales para las reacciones ácido-base con el fin de determinar el pH del efluente y para calcular las formas ionizadas de los VFA's, concentraciones de nitrógeno, amonio libre y CO_2 (Batstone et al. [5]).

Además, se incluyen inhibiciones de pH (en todos los grupos bacterianos) inhibiciones por hidrogeno, especialmente a los grupos acetogénicos, e inhibiciones de amonio libre para la metanogénesis acetoclastica. El resultado del conjunto de ecuaciones diferenciales produce 32 variables de estado dinámico; sin embargo el modelo no incluye otros aspectos como la precipitación de sólidos y sistemas de reducción de sulfatos.

CAPÍTULO 3

Simulación Rigurosa de la DA por Aspen Plus

Resumen

En este capítulo se presenta la aplicación del simulador de procesos **Aspen Plus** a la DA. Este capítulo se basa en los resultados que se reportaron recientemente en la literatura sobre la simulación rigurosa de la DA por medio de **Aspen Plus**. Primero se presenta una breve introducción de **Aspen Plus** como un simulador de procesos. Después se especifica el modelo termodinámico empleado para las simulaciones de los casos de estudio, así como los conjuntos de reacciones, parámetros y las cinéticas bioquímicas que se consideran. Después de esto, se establecen los pasos para extender la simulación de procesos por **Aspen Plus** a otras aplicaciones.

3.1 INTRODUCCION A ASPEN PLUS

La simulación de procesos con **Aspen Plus** permite predecir el comportamiento de un proceso mediante relaciones básicas de ingeniería, tales como balances de masa y energía, equilibrio químico y fases, y cinéticas de reacción. Teniendo datos fiables termodinámicos, condiciones reales de funcionamiento, y los modelos rigurosos de equipos **Aspen Plus**, se puede simular el comportamiento real de la planta. Así, esta herramienta puede ayudar a diseñar mejores plantas y aumentar la rentabilidad de las plantas existentes.

En **Aspen Plus** es posible cambiar las especificaciones, la configuración del diagrama de flujo, las condiciones de operación y composiciones iniciales, para ejecutar nuevos casos y analizar una gran cantidad de alternativas. Para el análisis de los resultados, puede generar gráficos, informes, planos en PFD y archivos en hojas de cálculo.

El simulador de procesos **Aspen Plus** se ha utilizado con frecuencia en el modelado de bioprocesos (Mohammad, P. ^[28]; Sahu et al. ^[39]; Wooley et al. ^[46]; Ramzan et al. ^[35]; Ojeda et al. ^[31]; Rajendran et al. ^[32]; Serrano R.P. ^[41]). El banco de datos, el número de operaciones unitarias, modelos termodinámicos, la opción de

definir nuevos compuestos y operaciones unitarias; hace a **Aspen Plus** una excelente herramienta.

Es importante saber algunas características y la funcionalidad del simulador de procesos **Aspen Plus**; por ello se presenta una breve información sobre el simulador y algunos aspectos generales que serán de gran utilidad al manipular el simulador de procesos.

3.1.1. Desarrollo de diagramas de flujo.

Un proceso consiste de componentes como mezcladores, separadores, calentadores, enfriadores, y transformaciones por operaciones unitarias. Estos componentes son transferidos de unidad a unidad a través de las corrientes del proceso.

Para transferir un proceso dentro del simulador **Aspen Plus** se realiza los siguientes pasos:

1. Definir la configuración del diagrama de flujo del proceso:
 - Definir las operaciones unitarias en el proceso.
 - Definir las corrientes del proceso que fluyen entre estas operaciones unitarias.
 - Seleccionar los modelos de operación unitaria de la biblioteca de **Aspen Plus** para describir cada operación unitaria.
2. Especificar los componentes químicos en el proceso. Se pueden tomar estos componentes de los bancos de datos de **Aspen Plus**, o se pueden definir.
3. Seleccionar los modelos termodinámicos apropiados de los disponibles en **Aspen Plus**, para representar las propiedades físicas de los componentes y las mezclas en el proceso.
4. Especificar las velocidades de flujo de los componentes y las condiciones termodinámica (por ejemplo, temperatura y presión) de las corrientes de alimentación del proceso.
5. Especificar las condiciones de operación para las operaciones unitarias en el diagrama de flujo.

Cuando se ha especificado esta información, se define un modelo de simulación del proceso.

3.1.2. Indicadores del estado de la simulación.

Para tener una idea general sobre el avance de una simulación en **Aspen Plus**, se tienen diferentes indicadores sobre la introducción o salida de datos (ver **Figura 3.1**). Los siguientes símbolos indican el estado de finalización de entrada, al completar las especificaciones para una nueva ejecución, observando los siguientes mensajes de estados:

Symbol	In an	Means
Input form	Required Input Complete
Input form	Required Input Incomplete
Input form	No data entered
Mixed form	Input and Results
Results form	No results present (calculations have not been run)
Results form	Results available without Errors or Warnings (OK)
Results form	Results available with Warnings
Results form	Results available with Errors
Results form	Results inconsistent with current input (input changed)
Input folder	No data
Input folder	Input Incomplete
Input folder	Input complete
Results folder	No results present
Results folder	Results available without Errors or Warnings (OK)
Results folder	Results available with Warnings
Results folder	Results available with Errors
Results folder	Results inconsistent with current input (input changed)

Figura 3.1 Iconos que muestran el estado de la simulación en **Aspen Plus**.

3.1.3. Selección de unidades de trabajo.

Un conjunto de unidades es una colección de unidades específicas para cada cantidad dimensional utilizado en **Aspen Plus**. El simulador **Aspen Plus** cuenta en su base de datos con tres conjuntos de unidades básicas:

- Unidades del sistema internacional (SI)
- Unidades de ingeniería Inglés (ENG)
- Unidades de ingeniería Métrico (MET)

3.1.4. Métodos de propiedades termodinámicas y fisicoquímicas.

La simulación de un proceso digestión anaerobia requiere el cálculo de propiedades fisicoquímicas y termodinámicas de las mezclas de compuestos presentes en el proceso, en todas las condiciones de composición, presión y temperatura que puedan llegarse a operar en la digestor. Esto es prácticamente imposible y se debe hacer uso de técnicas de predicción que permitan estimar estas propiedades.

No es suficiente que el simulador cuente con los mejores algoritmos de cálculo, los más rápidos y estables; si se selecciona el método incorrecto de predicción de propiedades, los resultados que se obtienen en la simulación tendrán poco o nada que ver con la realidad del proceso. También resulta imposible realizar una consideración detallada de todas las posibles mezclas de compuestos que pueden presentarse en la simulación de un reactor anaerobio, a fin de poder establecer el método de predicción más adecuado para cada una de ellas. Por ello una adecuada selección de estas técnicas será crucial para un cálculo preciso simulado del equipo y las corrientes de entrada y salida.

El modelo de soluciones ideales es útil para proporcionar una primera aproximación y una referencia, pero las desviaciones de la idealidad son con frecuencia grandes (Renon et al. [36]). La interpolación y la extrapolación de los datos termodinámicos de mezclas líquidas son necesarias para calcular los coeficientes de actividad en la fase líquida y del gas en el reactor anaerobio. El método termodinámico NRTL (Non-Random Two-Liquid model) se elige como el método de propiedades, debido a que se recomienda para el tipo de compuestos que se consideran en la DA.

El modelo NRTL elimina las limitaciones de Wilson para predecir el equilibrio líquido-líquido, aunque tiene tendencia a establecer falsas separaciones de fases. Es capaz de representar el comportamiento de los equilibrios LV, LL y LLV. En general es más preciso que Wilson y superior a otros modelos en sistemas de mezcla de compuestos orgánicos y agua. Es consistente termodinámicamente y puede aplicarse a sistemas ternarios y de orden superior usando parámetros obtenidos por regresión de datos de equilibrio binario.

El método de propiedades por default NRTL, tiene una amplia aplicación de los sistemas químicos ideales y no ideales de baja presión. Aspen Plus cuenta con varios modelos de coeficientes de actividad adicionales y ecuaciones de estado para el modelado de sistemas químicos.

Elegir el método apropiado de propiedades físicas es a menudo la decisión clave en la determinación de la precisión de los resultados en la simulación. Un método de propiedad es un conjunto de métodos y modelos que **Aspen Plus** utiliza para calcular las propiedades termodinámicas y de transporte.

Las propiedades termodinámicas son: coeficiente de fugacidad (valores K), entalpía, entropía, energía libre de Gibbs y volumen.

Las propiedades de transporte son: viscosidad, conductividad térmica, coeficiente de difusión y tensión superficial.

Aspen Plus incluye un gran número de métodos de propiedades que son suficientes para la mayoría de las aplicaciones. Sin embargo, se puede crear nuevos métodos de propiedades para satisfacer las necesidades en la simulación. Es posible seleccionar uno o más métodos de propiedades para modelar las propiedades de los sistemas específicos del diagrama de flujo.

3.1.5. Reacciones cinéticas de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW) en Aspen Plus para reactores.

Las cinéticas enzimáticas que describen el crecimiento de microorganismos en procesos biológicos se pueden aproximar como expresiones de velocidad del tipo Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW). Para especificar la cinética LHHW en Aspen Plus, es necesario:

- Definir el tipo y la estequiometría de las reacciones.
- Introducir el equilibrio o parámetros cinéticos.
- Especificar términos de adsorción opcionales.

La forma de la cinética de LHHW es,

$$r = \frac{(\text{factor cinético})(\text{expresión de la fuerza motriz})}{(\text{término de adsorción})} \quad (3.1)$$

$$\text{Factor cinético} = k \left(T/T_0 \right)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_0]} \quad (3.2)$$

$$\text{expresión de la fuerza motriz} = K_1 \left(\prod_{i=1}^N C_i^{\alpha_i} \right) - K_2 \left(\prod_{j=1}^N C_j^{\beta_j} \right) \quad (3.3)$$

$$\text{término de adsorción} = \left[\sum_{i=1}^M K_i \left(\prod_{j=1}^N C_j^{\nu_{ij}} \right) \right]^m \quad (3.4)$$

Donde r es la velocidad de reacción, k es la velocidad de reacción, T es la temperatura absoluta, T_0 es la temperatura de referencia, n es el exponente de la temperatura, m es el exponente del término de adsorción, E energía de activación, R

constante universal de los gases, K_i constantes de la fuerza motriz, N número de componentes, M número de términos en la expresión de adsorción.

3.1.5. Estequiometría de la reacción en Aspen Plus.

Al especificar reacciones estequiométricas en reactores, **Aspen Plus** comprueba el equilibrio de masas de la estequiometria basado en el coeficiente estequiométrico y el peso molecular de los componentes que intervienen en las reacciones. En **Aspen Plus** se genera un error o una advertencia durante la traducción de datos de entrada si se produce un desequilibrio de masas, y por ende la simulación no procederá debido a los datos erróneos de entrada. Se puede utilizar el cuadro de tolerancia de error en balance de masa para modificar la tolerancia absoluta de la estequiometría. El valor pre-establecido de tolerancia es de 1 kg/kgmole (**Figura 3.2**).

Figura 3.2 Error de tolerancia en el balance de masa.

3.2 MODELO PSM PARA SIMULACION RIGUROSA DE LA DA

Rajendran et al. ^[32] propusieron recientemente un Modelo de Simulación de Procesos (Process Simulation Model, PSM) con el objetivo de simular procesos de DA en Aspen Plus para diferentes tipos de residuos agroindustriales. El modelo se puede consultar en la base de datos sueca <http://hdl.handle.net/2320/12358> (**Rajendran et al.** ^[32]).

El PSM es un modelo de referencia para la DA, que incluye reacciones intermedias, inhibiciones y cinéticas. El modelo fue examinado y validado con resultados experimentales para reactores que operan en condiciones termófilas (55°C) de trabajos previos y plantas industriales.

El PSM se desarrolla principalmente sobre la base de las cuatro etapas de la DA: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. Estas cuatro etapas incluyen la descomposición de los metabolismos intermedios, cómo los sustratos complejos tales

como carbohidratos, proteínas y grasas, a formas monoméricas y finalmente a metano y dióxido de carbono. Para este propósito, las reacciones implicadas en estas cuatro etapas se recolectaron de trabajos previos. Las ecuaciones que no se resuelven a través de la estequiometría de **Aspen Plus**, se resuelven por medio de una rutina externa con el software **MATLAB** (Rajendran et al. [32]).

El PSM considera dos clases de reacciones:

- (i) Reacciones de la etapa de hidrólisis: La hidrólisis es un paso limitante en la DA. La hidrólisis se representa por un conjunto de trece reacciones separadas, que se muestran en la **Tabla 3.1**. La conversión fraccional de las sustancias reaccionantes a productos está en escala de 0 a 1.
- (ii) Reacciones de las otras etapas de la DA (reacciones acidogénicas, acetogénicas y metanogénicas): En total se consideran 33 reacciones en las tres etapas (véase **Tabla 3.2**).

La **Figura 3-3** muestra el diagrama de bloques de PSM.

Figura 3.3 Diagrama de flujo del modelo de simulación de proceso (Rajendran et al. [32]).

El procedimiento de solución es iterativo a partir de la salida de datos del conjunto de reacciones (a) y el conjunto de reacciones (b). Los resultados se generan en una tabla con los balances de masa y energía, y donde la cantidad de producción de biogás puede ser calculada. En cada bloque de cálculo, se incorporan efectos de inhibición de pH, temperatura, y amoníaco. Los parámetros del proceso tales como

velocidad de carga orgánica (OLR), el volumen del reactor, y HRT se incluyen en el modelo para considerar los parámetros importantes en la producción de biogás (Rajendran et al. ^[32]).

Tabla 3.1 Reacciones que se llevan a cabo en las rutas metabólicas de la digestión anaerobia Rajendran et al. ^[32].

No.	Compuesto	Reacción de Hidrolisis	Avance de la reacción
1	Starch	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.6 ± 0.2
2	Cellulose	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.4 ± 0.1
3	Hemicellulose	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow 2.5 C_2H_4O_2$	0.5 ± 0.2
4	Hemicellulose	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_5$	0.6 ± 0.0
5	Xylose	$C_5H_{10}O_5 \rightarrow C_5H_4O_2 + 3 H_2O$	0.6 ± 0.0
6	Cellulose	$C_6H_{12}O_6 + H_2O \rightarrow 2 C_2H_6O + 2 CO_2$	0.4 ± 0.1
7	Ethanol	$2 C_2H_6O + CO_2 \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + CH_4$	0.6 ± 0.1
8	Soluble protein	$C_{13}H_{25}O_7N_3S + 6 H_2O \rightarrow 6.5 CO_2 + 6.5 CH_4 + 3 H_3N + H_2S$	0.5 ± 0.2
9	Insoluble protein (I.P)	$I.P + 0.3337 H_2O \rightarrow 0.045 C_6H_{14}N_4O_2 + 0.048 C_4H_7NO_4 + 0.047 C_4H_9NO_3 + 0.172 C_3H_7NO_3 + 0.074 C_5H_9NO_4 + 0.111 C_5H_9NO_2 + 0.25 C_2H_5NO_2 + 0.047 C_3H_7NO_2 + 0.067 C_3H_6NO_2S + 0.074 C_5H_{11}NO_2 + 0.07 C_6H_{13}NO_2 + 0.046 C_6H_{13}NO_2 + 0.036 C_9H_{11}NO_2$	0.6 ± 0.1
10	Triolein	$C_{57}H_{104}O_6 + 3 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + 3 C_{18}H_{34}O_2$	0.5 ± 0.2
11	Tripalmitate	$C_{51}H_{98}O_6 + 8.436 H_2O \rightarrow 4 C_3H_8O_3 + 2.43 C_{16}H_{34}O$	0.5 ± 0.3
12	Palmito-olein	$C_{37}H_{70}O_5 + 4.1 H_2O \rightarrow 2.1 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{34}O_2$	0.6 ± 0.2
13	Palmito-linolein	$C_{37}H_{68}O_5 + 4.3 H_2O \rightarrow 2.2 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{32}O_2$	0.6 ± 0.2

Tabla 3.2 Lista de reacciones de aminoácidos, acidogénicas, acetogénicas y metanogénicas con constantes cinéticas incluidos en PSM (Rajendran et al. ^[32]).

No.	Compound	Chemical reactions	Kinetic constant
<i>Amino acid degradation reactions</i>			
1	Glycine	$C_2H_5NO_2 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N$	$1.28 * 10^{-02}$
2	Threonine	$C_4H_9NO_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N$	$1.28 * 10^{-02}$
3	Histidine	$C_6H_8N_3O_2 + 4 H_2O + 0.5 H_2 \rightarrow CH_3NO + C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + 2 H_3N + CO_2$	$1.28 * 10^{-02}$
4	Arginine	$C_6H_{14}N_4O + 3 H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + 4 H_3N + CO_2$	$1.28 * 10^{-02}$
5	Proline	$C_5H_9NO_2 + H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + H_3N$	$1.28 * 10^{-02}$

6	Methionine	$C_5H_{11}NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + CO_2 + H_3N + H_2 + CH_4S$	$1.28 * 10^{-02}$
7	Serine	$C_3H_7NO_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
8	Threonine	$C_4H_9NO_3 + H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + H_3N + H_2 + CO_2$	$1.28 * 10^{-02}$
9	Aspartic acid	$C_4H_7NO_4 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + 2 CO_2 + 2 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
10	Glutamic acid	$C_5H_9NO_4 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N + CO_2$	$1.28 * 10^{-02}$
11	Glutamic acid	$C_5H_9NO_4 + 2 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
12	Histidine	$C_6H_8N_3O_2 + 5 H_2O \rightarrow CH_3NO + 2 C_2H_4O_2 + 2 H_3N + CO_2 + 0.5 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
13	Arginine	$C_6H_{14}N_4O_2 + 6 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + 4 H_3N + 2 CO_2 + 3 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
14	Lysine	$C_6H_{14}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + C_4H_8O_2 + 2 H_3N$	$1.28 * 10^{-02}$
15	Leucine	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
16	Isoleucine	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
17	Valine	$C_5H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_4H_8O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
18	Phenylalanine	$C_9H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6 + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
19	Tyrosine	$C_9H_{11}NO_3 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6O + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
20	Tryptophan	$C_{11}H_{12}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_8H_7N + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
21	Glycine	$C_2H_5NO_2 + 0.5 H_2O \rightarrow 0.75 C_2H_4O_2 + H_3N + 0.5 CO_2$	$1.28 * 10^{-02}$
22	Alanine	$C_3H_7NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 * 10^{-02}$
23	Cysteine	$C_3H_6NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 0.5 H_2 + H_2S$	$1.28 * 10^{-02}$

Acidogenic reactions

24	Dextrose	$C_6H_{12}O_6 + 0.1115 H_3N \rightarrow 0.1115 C_5H_7NO_2 + 0.744 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.4409 C_4H_8O_2 + 0.6909 CO_2 + 1.0254 H_2O$	$9.54 * 10^{-03}$
25	Glycerol	$C_3H_8O_3 + 0.4071 H_3N + 0.0291 CO_2 + 0.0005 H_2 \rightarrow 0.04071 C_5H_7NO_2 + 0.94185 C_3H_6O_2 + 1.09308 H_2O$	$1.01 * 10^{-02}$

Acetogenic reactions

26	Oleic acid	$C_{18}H_{34}O_2 + 15.2396 H_2O + 0.2501 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.6998 C_2H_4O_2 + 14.4978 H_2$	$3.64 * 10^{-12}$
27	Propionic acid	$C_3H_6O_2 + 0.06198 H_3N + 0.314336 H_2O \rightarrow 0.06198 C_5H_7NO_2 + 0.9345 C_2H_4O_2 + 0.660412 CH_4 + 0.160688 CO_2 + 0.00055 H_2$	$1.95 * 10^{-07}$
28	Isobutyric acid	$C_4H_8O_2 + 0.0653 H_3N + 0.8038 H_2O + 0.0006 H_2 + 0.5543 CO_2 \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 1.8909 C_2H_4O_2 + 0.446 CH_4$	$5.88 * 10^{-06}$
29	Isovaleric acid	$C_5H_{10}O_2 + 0.0653 H_3N + 0.5543 CO_2 + 0.8044 H_2O \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 0.8912 C_2H_4O_2 + C_3H_6O_2 + 0.4454 CH_4 + 0.0006 H_2$	$3.01 * 10^{-08}$
30	Linoleic acid	$C_{18}H_{32}O_2 + 15.356 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 9.02 C_2H_4O_2 + 10.0723 H_2$	$3.64 * 10^{-12}$
31	Palmitic acid	$C_{16}H_{34}O_2 + 15.253 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.4402 C_2H_4O_2 + 14.9748 H_2$	$3.64 * 10^{-12}$

Methanogenic reactions

32	Acetic acid	$C_2H_4O_2 + 0.022 H_3N \rightarrow 0.022 C_5H_7NO_2 + 0.945 CH_4 + 0.066 H_2O + 0.945 CO_2$	$2.39 * 10^{-03}$
33	Hydrogen	$14.4976 H_2 + 3.8334 CO_2 + 0.0836 H_3N \rightarrow 0.0836 C_5H_7NO_2 +$	$2.39 * 10^{-03}$

3.3 ESTRUCTURA E IMPLEMENTACION DEL MODELO PSM EN ASPEN PLUS

3.3.1. Inicio de Aspen Plus.

Para comenzar a trabajar en **Aspen Plus**, se realiza lo siguiente:

- Haga clic en Inicio y, a continuación, seleccione programas → **AspenTech** → **Aspen plus interface**.
- En el cuadro de diálogo de inicio (véase la **Figura 3.4**), elija la opción: **Open an Existing Simulation** y seleccionamos el archivo que previamente se ha descargado de la página sueca: <http://hdl.handle.net/2320/12358>.

Figura 3.4 Cuadro de diálogo para elegir una nueva o existente simulación.

- Enseguida se abre la ventana principal de **Aspen Plus** y podemos tener acceso al **modelo de simulación de procesos PSM**.

3.3.2. Diagrama de flujo.

El diagrama de flujo del proceso de la DA del modelo PSM (véase la **Figura 3.5**), comprende los siguientes equipos de proceso:

- Existen diferentes tipos de corrientes de entrada y salida, tales como, de calentamiento, de material y de trabajo, las cuales se conectan a los bloques de operación de **Model Library** (corrientes y unidades de proceso). La corriente

INPUT engloba la velocidad de flujo de agua residual, incluyendo las condiciones termodinámicas de entrada y las concentraciones respectivas para cada caso de estudio (ver la Figura 3.6).

Figura 3.5 Diagrama de flujo del modelo PSM.

Component	Value
WATER	0.94
GLYCEROL	
OLEIC-AC	
DEXTROSE	0.01
ACETI-AC	0
PROPI-01	0
ISOBU-01	
ISOVA-01	
H+	
OH-	
NH3	0.001
NH4+	

Figura 3.6 Especificaciones de la corriente de entrada de material **INPUT**.

- b) El mezclador **Mixer (B2)** combina flujos de materia en una corriente de salida. Se puede especificar una presión de salida o una caída de presión de los flujos de materia. El modelo del mezclador determina la temperatura de la corriente de salida y las fases, mediante la realización de un cálculo de equilibrio de fases (véase la Figura 3.7), de un flash adiabático de las composiciones de las corrientes de alimentación.

Figura 3.7 Especificación de la información requerida para el Mixer (B2).

c) La corriente **Stream** [6] conecta los bloques de operación del mezclador **Mixer** (B2) y el reactor **RStoic** (B3) en el diagrama de flujo y llevan flujo de materia y energía de un bloque a otro (ver la Figura 3.8). Las corrientes pueden ser:

- Corrientes de alimentación en el diagrama de flujo.
- Conexiones internas dentro del diagrama de flujo.

Figura 3.8 Resultados de la corriente **Stream** [6].

d) El modelo de reactor **RStoic** (B3) se usa cuando:

- La cinética de la reacciones son desconocidas o poco importantes.
- La estequiometría es conocida.
- Se puede especificar el grado de reacción o conversión.
- Se tienen las condiciones de operación del reactor (ver la Figura 3.9).

El reactor **Rstoic** puede manejar reacciones que se producen independientemente en una serie de reactores. También puede realizar los cálculos de la selectividad del producto y el calor de reacción. El reactor estequiométrico se utiliza para las reacciones de hidrólisis, las cuales son un conjunto de reacciones estequiométricas en equilibrio las cuales representan la degradación de los componentes primarios en la digestión anaerobia, las cuales tienen lugar en el reactor estequiométrico **Rstoic (B3)** (véase la [Figura 3.9](#)).

Figura 3.9 Especificación de las condiciones de operación y reacciones estequiométricas para el reactor **Rstoic (B3)**.

La [Figura 3.10](#) representa la especificación de los coeficientes estequiométricos y la fracción de conversión, en base a reactivo limitante.

Figura 3.10 Definición de la estequiometría.

- e) La corriente **Stream [5]**, es una corriente de interconexión que conectan los bloques de operación **Rstoic (B3)** y el reactor **RCSTR (B1)** en el diagrama de flujo, y lleva el flujo de materia y energía de productos y reactivos (ver [figura](#)

3-11) que no reaccionaron en el reactor **RStoic (B3)** y que a su vez es la alimentación al reactor **RCSTR (B1)**.

Figura 3.11 Variables de estado y composición de flujo de materia en **Stream** [5].

f) El modelo de reactor **RCSTR** (Continuous-Stirred Tank Reactor), se puede utilizar cuando:

- Se conocen las cinéticas de la reacciones y las condiciones de operación (ver la Figura 3.12).
- Los contenidos del reactor tienen las mismas propiedades que la corriente de salida.

RCSTR puede modelar simultáneamente reacciones de equilibrio con reacciones basadas en velocidad de reacción; además puede calcular la carga térmica en el reactor, proporcionando la temperatura o viceversa. El reactor continuo de tanque agitado **RCSTR (B1)** se utilizó para el otro conjunto de las reacciones en las etapas de la digestión anaerobia, contemplando la acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis.

Figura 3-12 Especificación de las condiciones de operación y conjunto de reacciones en el reactor **RCSTR** (**B1**).

g) El reactor **RCSTR** (**B1**) tiene dos corrientes de salida (véase la Figura 3.13). La primer corriente [**LIQUID**], contiene productos que no reaccionaron, tales como la materia inerte, agua, aminoácidos, ácido acético, etanol, trazas de ácidos grasos volátiles y celulosa del agua residual de cada caso de estudio. En la segunda corriente [**BIOGAS**] se recupera el biogás generado por los sistemas de reacción en ambos reactores del diagrama de flujo. El biogás está compuesto principalmente por dióxido de carbono, metano, hidrogeno y trazas de amoniaco, sulfuro de hidrogeno y etanol.

Figura 3.13 Configuración de las corrientes de salida de **RCSTR** (**B1**).

3.3.3. Modelo termodinámico.

En un diagrama de flujo en **Aspen Plus**, es posible definir un modelo termodinámico distinto para cada etapa o bloque de operación y, así simular el proceso de una manera más realista. El método de propiedades termodinámicas, que usa el modelo **PSM** es el modelo **NRTL** (véase la Figura 3.14) para todo el diagrama de flujo, en la

simulación global del reactor anaerobio; el cual está integrado por dos distintos reactores.

Figura 3.14 Modelo termodinámico NRTL usado en el modelo PSM.

3.3.4. Selección de unidades de trabajo.

En cuanto al conjunto de unidades que trabaja el modelo PSM, comprende una serie de conjunto de unidades; los cuales se adaptan dependiendo del caso de estudio (ver la Figura 3.15).

Figura 3.15 Lista de conjunto de unidades en cuadro de diálogo Units.

3.3.5. Componentes.

La base de datos en **Aspen Plus** contiene un gran número de componentes convencionales. Las propiedades físicas de muchos de los componentes clave que se utilizan en la simulación del proceso de la DA no están disponibles en las bases de datos **Aspen plus**. De hecho, muchas de estas propiedades necesarias para simular con éxito este proceso no están disponibles en cualquier lugar. Por ello habrá que definir nuevos compuestos que no se encuentran en la base de datos de **Aspen plus**. Además, la introducción de las propiedades disponibles en cada simulación es difícil y

tediosa. Por lo tanto, se debe estimar las propiedades cuando sea necesario, y determinar un conjunto de propiedades físicas consistentes para todos los componentes de interés. Los compuestos que faltan en el modelo PMS y las propiedades físicas se obtuvieron de [Wooley et al. \[45\]](#). La [Figuras 3.16](#) muestra todos los componentes introducidos en el modelo PSM.

Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
GLYCEROL	Conventional	GLYCEROL	C3H8O3
OLEIC-AC	Conventional	OLEIC-ACID	C18H34O2
DEXTROSE	Conventional	DEXTROSE	C6H12O6
ACETI-AC	Conventional	ACETIC-ACID	C2H4O2-1
PROPI-01	Conventional	PROPIONIC-ACID	C3H6O2-1
ISOBU-01	Conventional	ISOBUTYRIC-ACID	C4H8O2-4
ISOVA-01	Conventional	ISOVALERIC-ACID	C5H10O2-D3
H+	Conventional	H+	H+
OH-	Conventional	OH-	OH-
NH3	Conventional	AMMONIA	H3N
NH4+	Conventional	NH4+	NH4+
CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
C5H7N02	Conventional	ETHYL-CYANOAC	C5H7N02
ARGININE	Conventional	ARGININE	C6H14N4O2-N2
HISTIDIN	Conventional	HISTIDINE-E-2	C6H8N3O2-E

Component ID	Type	Component name	Alias
LYSINE	Conventional	LYSINE	C6H14N2O2
TYROSINE	Conventional	TYROSINE	C9H11N03
TRYPTOPH	Conventional	TRYPTOPHAN	C11H12N2O2
PHENYLAL	Conventional	L-PHENYLALANIN	C9H11N02
CYSTEINE	Conventional	CYSTEINE-E-2	C3H6N02S-E
METHIONI	Conventional	METHIONINE	C5H11N02S
THREONIN	Conventional	THREONINE	C4H9N03
SERINE	Conventional	SERINE	C3H7N03
LEUCINE	Conventional	LEUCINE	C6H13N02
ISOLEUCI	Conventional	ISOLEUCINE	C6H13N02-I
VALINE	Conventional	VALINE	C5H11N02
GLUTAMIC	Conventional	L-GLUTAMIC-ACID	C5H9N04
ASPARTIC	Conventional	ASPARTIC-ACID	C4H7N04
GLYCINE	Conventional	GLYCINE	C2H5N02-D1
ALANINE	Conventional	ALANINE	C3H7N02
PROLINE	Conventional	PROLINE	C5H9N02-N8

Component ID	Type	Component name	Alias
HYDROGEN	Conventional	HYDROGEN	H2
METHANE	Conventional	METHANE	CH4
INDOLE	Conventional	INDOLE	C8H7N
FROMAMID	Conventional	FORMAMIDE	CH3NO
H2S	Conventional	HYDROGEN-SULF	H2S
CH4S	Conventional	METHYL-MERCAP	CH4S
BENZENE	Conventional	BENZENE	C6H6
PHENOL	Conventional	PHENOL	C6H6O
H2CO3	Conventional	CARBONIC-ACID	H2CO3
HCO3-	Conventional	HCO3-	HCO3-
CO3-2	Conventional	CO3--	CO3-2
HS-	Conventional	HS-	HS-
CELLULOS	Conventional	CELLULOSE	CELLULOSE
HEMECELL	Conventional	GLUTARIC-ACID	C5H8O4
GLUCOSE	Conventional	DEXTROSE	C6H12O6
TRIOLEIN	Conventional	TRIOLEIN	C57H104O6

Component ID	Type	Component name	Alias
GLUCOSE	Conventional	DEXTROSE	C6H12O6
TRIOLEIN	Conventional	TRIOLEIN	C57H104O6
TRIPALM	Conventional	TRIPALMITIN	C51H98O6
PALM	Conventional	1-HEXADECANOL	C16H34O
SN-1-01	Conventional	SN-1-PALMITO-2-C	C37H70O5-1
SN-1-02	Conventional	SN-1-PALMITO-2-L	C37H68O5-1
XYLOSE	Conventional	D-XYLOSE	C5H10O5
FURFURAL	Conventional	FURFURAL	C5H4O2
LINOLEIC	Conventional	LINOLEIC-ACID	C18H32O2
STARCH	Conventional	CELLULOSE	CELLULOSE
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
PROTEIN	Pseudocompon		C13H25O7N3S
KERATIN	Pseudocompon		C4.39H8N0.21
ACETATE	Conventional	CH3COO-	CH3COO-
INERT	Pseudocompon		INERT
*			

Figura 3.16 Lista de componentes en Aspen Plus del modelo PSM.

3.3.6. Especificación de componentes que no están en la base de datos.

Para definir un componente que no está en los base de datos en **Aspen Plus**, se debe suministrar todos los parámetros de propiedades requeridas para estos componentes. La estructura molecular, peso molecular, y el punto de ebullición normal son la

información más básica que necesitan el grupo de aportación y los métodos de estados utilizados en la estimación de propiedades. Se requiere el peso molecular en todas las simulaciones. El punto de ebullición normal no es necesario en los cálculos de propiedades, pero se utiliza para estimar otros parámetros tales como, la temperatura crítica y presión crítica; si no se cuenta con esta información.

El modelo PMS tiene tres compuestos clave en el proceso de simulación, los cuales no se encuentran en la base de datos de componentes; estos son proteínas, queratina e inertes (véase la **Figura 3.17**). Estos componentes se introducen en la base de datos y se especifican los puntos de ebullición, densidad y peso molecular; así **Aspen Plus** podrá estimar sus propiedades termodinámicas y propiedades físicas.

Figura 3.17 Especificación de componentes que no están en la base de datos de **Aspen Plus**.

3.3.7. Reacciones del modelo PSM

En la digestión anaerobia ocurren una cantidad enorme de reacciones. La comunidad microbiana dentro de la DA es bastante compleja, compuesta de más de 500 especies (**Méndez-Acosta et al. [25]**), por ello se desconoce las reacciones que son llevadas a cabo por toda la comunidad microbiana.

Las constantes cinéticas de las reacciones se obtuvieron de modelos anteriores, tales como ADM1 y modelos integrales (**Angelidaki et al. [3][4]**; **Batstone et al. [5]**; **Serrano R.P. [41]**). Las reacciones de ADM1, que no se resuelven por estequiometría, se balancearon en el PSM. Las ecuaciones de hidrólisis se incluyen carbohidratos, proteínas y grasas en el conjunto de reacciones (a) (ver **Tabla 3.1**). Los carbohidratos se incorporan como celulosa, almidón y hemicelulosas. Las proteínas se añadieron en base a su solubilidad, tales como las proteínas solubles y las proteínas insolubles. Las grasas constan de tripalmitato, trioleína, palmito-oleína y linoleico palmítico.

En el conjunto de reacciones (b) (ver la [Tabla 3.2](#)), diferentes subconjuntos de reacciones se añadieron para calcular la cinética de las reacciones. Cada subconjunto tiene un programa en FORTRAN para determinar la velocidad de reacción en las fases acidogénicas, acidogénicas y metanogénicas. En total, se utilizaron diez bloques de cálculo que fueron usados para el glicerol, ácido valérico, ácido butírico, ácido propiónico, ácido linoleico, aminoácidos, azúcares, ácido palmítico, ácido oleico, metanogénesis, y las reacciones utilizando hidrógeno ([Rajendran et al. \[32\]](#)).

3.3.8. Condiciones iniciales y datos de entrada.

Una vez que se introducen todos los componentes que participan en las reacciones, se alimentan los flujos másicos con los cuales iniciará la simulación, tales como los sólidos totales (ST), sólidos volátiles (SV), tasa de flujo, la composición de la masa, temperatura, y TRH de los sustratos, siendo estos los parámetros de entrada para el conjunto de reacciones (a) ([Tabla 3.1](#)). Esto estimará la cantidad de monómeros liberados al segundo reactor, que contiene el conjunto de reacciones (b) ([Tabla 3.2](#)). Dependiendo del monómero, estos pasan a través de diferentes bloques de cálculo. Por ejemplo, los aminoácidos liberados por las proteínas en el conjunto de reacciones (a), pasan a través del bloque cálculo de los aminoácidos, donde se descompone en diferentes VFA. Entonces, los VFA producidos pasan al bloque de cálculo del ácido butírico, ácido valérico, y ácido propiónico antes de que lleguen al bloque de cálculo final, de la metanogénesis. A partir de entonces, la cantidad de metano, dióxido de carbono y el TS sobrantes se reportan en las unidades deseadas ([Rajendran et al. \[32\]](#)).

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:
 Temperature: **296.15** **K**
 Pressure: **101325** **N/sqm**
 Vapor fraction:
 Total flow basis: **Volume**
 Total flow rate: **0.333** **l/day**
 Solvent:

Composition

Component	Value
WATER	0.94
GLYCEROL	
OLEIC-AC	
DEXTROSE	0.01
ACETI-AC	0
PROPI-01	0
ISOBU-01	
ISOVA-01	
H+	
OH-	
NH3	0.001
NH4+	
CO2	
CSH7NO2	
ARGININE	
HISTIDIN	
LYSINE	
TYROSINE	
TRYPTOPH	
PHENYLAL	
CYSTEINE	
METHIONI	
THREONIN	
SERINE	
LEUCINE	
ISOLEUCI	
VALINE	
GLUTAMIC	
ASPARTIC	
GLYCINE	
ALANINE	
PROLINE	
HYDROGEN	
METHANE	
INDOLE	
FORMAMID	
H2S	
CH4S	
BENZENE	
PHENOL	
H2CO3	
HCO3-	
CO3-2	
HS-	
CELLULOS	0.022
HEMECELL	0.01
GLUCOSE	
TROLEIN	0.0004
TRIPALM	0.0004
PALM	
SN-1--01	0
SN-1--02	0.0004
XVLOSE	0
FURFURAL	
LNOLIC	
STARCH	0
ETHANOL	
PROTEIN	0.003
KERATIN	0.0018
ACETATE	
INERT	0.011
Total	1

Figura 3.18 Especificación de la composición del agua residual del caso de estudio.

3.3.9. Bloques Fortran.

Un bloque de cálculo en **Aspen Plus** permite insertar declaraciones validas de cálculo en **Fortran** para el diagrama de flujo; para que realice tareas definidas por el usuario. El uso de **Fortran** permite escribir modelos propios, cálculos y ajuste de variables de entrada antes de ser utilizados, así como llamar a subrutinas externas, entre otras.

Aspen Plus comprueba el código **Fortran** interactivamente cuando se escribe. Así la mayoría de los errores de sintaxis se detectan antes de una corrida. Si el indicador de estado en una hoja **Fortran** es ( ) , es necesario revisar lo que está incompleto o los errores cometidos, debido a la sintaxis.

Cada bloque de cálculo del conjunto de reacciones (b) tiene un programa de **Fortran**, que calcula los productos entregados de cada una de las reacciones. Los bloques de cálculo se asignan con diferentes variables tales como la velocidad de flujo, VFA's, NH_4^+ , temperatura, parámetro cinético y H_2 , lo cual importa la cantidad de

reactantes y la velocidad de reacción para cada bloque de cálculo basado de los resultados aportados del conjunto de reacciones (a).

Los parámetros cinéticos se obtuvieron a partir de estudios previos en la literatura (Andrews, J.F. ^[2]; Angelidaki et al. ^{[3][4]}; Batstone et al. ^[5]). Se utilizó ley de potencia para calcular la velocidad de reacción, que incluye la tasa de crecimiento específica de los microorganismos, y las inhibiciones de amoníaco. El pH se calcula en función de las constantes de equilibrio químicas dentro de los bloques de cálculo para cada VFA, basados en Angelidaki et al. ^[4] y Cheng, J. ^[12]. Los resultados que se obtienen de la simulación se presentan en las unidades $\text{m}^3 \text{ día}^{-1}$, con lo cual puede ser recalculados, de acuerdo con las unidades deseadas.

Name	Status
AMINODEG	Results Available
BUTYDEG	Results Available
DEXTDEG	Results Available
GLYCDEG	Results Available
LINODEG	Results Available
METHAN	Results Available
OLEICDEG	Results Available
PALMDEG	Results Available
PROPDEG	Results Available
VALEDEG	Results Available

Figura 3.19 Bloques de cálculo en **Aspen Plus** incorporados al modelo PSM en código **Fortran**.

3.3.10 Resultados para aplicaciones reportadas en la literatura.

El modelo PSM fue validado con datos experimentales, los cuales utilizan diferentes sustratos con diversas condiciones de proceso, incluyendo datos de estudio en investigación de laboratorio a pequeña escala y plantas industriales de DA.

Tomando como base la información del estiércol de vaca (caso 1), especificando las condiciones de operación, el flujo volumétrico y las fracciones másicas, se puede ejecutar la simulación si se presenta el mensaje de **Input Complete** en el simulador de procesos **Aspen Plus**. Enseguida nos muestra los siguientes resultados (ver Figura 3.20):

Figura 3.20 Resumen de resultados para el caso 1.

El estado de las especificaciones se muestra en todo momento en la barra de estado de la ventana principal. Es posible modificar cualquiera de las especificaciones de entrada en cualquier momento antes o después de una simulación.

El progreso de la simulación se puede observar consultando el **Control Panel** (ver Figura 3.21). El panel de control es un área de mensajes que contiene el progreso, diagnóstico, advertencias y mensajes de error generados durante los cálculos, además el orden de los bloques de simulación e iteraciones de convergencia de la ejecución.

Figura 3.21 Progreso de la simulación en el panel de control.

Al ejecutar la simulación del caso 1 de estudio se presentan avisos (**Results Available with Warnings**), lo cual indica que se generaron mensajes de advertencias durante los cálculos; por ello será necesario checar el historial de estos mensajes en el panel de control. Los desequilibrios pueden ocurrir por muchas razones, por ejemplo,

inadecuada estequiometría o especificaciones de los conjunto de fracciones másicas o molares, tolerancias de convergencia incorrectas, inconsistencia en las velocidades cinéticas del usuario, o cambios de flujos.

Las advertencias se deben a la falta de propiedades físicas de componentes convencionales que no se encontraron en el banco de datos, advertencias en la especificación del diagrama de flujo, cuyas variables de entrada pueden ser incompatibles con el acceso de esas variables. También advertencias debidas a estructuras de componentes que no se han definido y por lo tanto **Aspen Plus** no puede usar el método de contribución de grupo para estimar las propiedades faltantes de algunos compuestos. Otra advertencia que se observa en la ejecución del caso 1 de estudio se adjudica al tipo de reacción de ley de potencia, debido a que algunas reacciones no satisfacen el balance de masa y por ello es necesario comprobar que la estequiometría o los pesos moleculares estén correctamente definidos.

Ahora, para observar los resultados obtenidos, principalmente el flujo de biogás, consultamos el resumen de resultados de las corrientes (**Results Summary-Streams**, **Figura 3.22**). Enseguida aparece un cuadro de diálogo que enlista una gran información de flujos y propiedades para las corrientes de entrada y salida del diagrama de flujo.

	INPUT	LIQUID	BIOGAS
Temperature K	296.1	328.1	328.1
Pressure N/sqm	101325	101325	101325
Vapor Frac	< 0.001	0	1
Mole Flow kmol/hr	0.001	0.001	< 0.001
Mass Flow kg/day	0.241	0.236	0.004
Volume Flow l/day	0.333	0.246	4.39
Enthalpy MMBtu/hr	> -0.001	> -0.001	> -0.001
Mass Flow kg/day			
WATER	0.226	0.225	< 0.001
GLYCEROL		< 0.001	trace
OLEIC-AC		trace	trace
DEXTROSE	0.002	trace	trace

Figura 3.22 Resumen de resultados de las corrientes del diagrama de flujo.

El valor experimental de producción de biogás 353.5 L/kg_{VS}día para el caso 1 esta reportado por **Kaparaju et al. 2009**. El reporte de unidades es respecto a los

kilogramos de VS introducidos, y el simulador reporta la cantidad introducida en kg_{totales} en la corriente **INPUT**=0.241 kg/día, entonces restamos los kilogramos que no son VS; esto es: el agua (**WATER**=0.226 kg/día) y el inerte (**INERT**=0.003 kg/día). Realizando dicha operación, se tiene: $0.241-0.226-0.003=0.012 \text{ Kg}_{\text{VS}}/\text{día}$. Para obtener la cantidad de biogás en $\text{L}/\text{Kg}_{\text{VS}}$ hay que dividir $(4.39 \text{ L}/\text{día})/(0.012 \text{ Kg}_{\text{VS}}/\text{día})=365.833 \text{ L}/\text{Kg}_{\text{VS}}$.

La **Tabla 3.3** muestra dos casos de estudio con sustrato y los datos operacionales experimentales, así como las diferencias encontradas al utilizar el modelo PSM y los datos experimentales.

Tabla 3.3 Diferentes sustratos con su condición de procesamiento y la comparación de los resultados experimentales y los resultados obtenidos a partir de la estimulación.

	Caso 1	Caso 2
Sustrato	Estiércol de vaca	Residuos sólidos municipales
HTR (días)	15	19
Volumen del digestor	5 L	3000 m ³
OLR	0.33 L·día ⁻¹	150 m ³ día ⁻¹
Sólidos Totales (%)	6	15
Sólidos Volátiles (%)	80	85
Resultados experimentales	353.5 L Kg _{VS} ⁻¹ día ⁻¹	9600 m ³ día ⁻¹
Resultados del modelo	365.83 L Kg _{VS} ⁻¹ día ⁻¹	10176 m ³ día ⁻¹
Diferencia en (%)	3.4	6.0

3.4 APLICACIÓN DEL MODELO PSM A TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES DEL TEQUILA (VINASAS)

Una problemática en la que está motivado este trabajo, es la simulación de la DA en el tratamiento de vinazas del Tequila, pues son aguas de desecho con alto contenido de materia orgánica que pueden causar eutroficación en los ríos cuando es descargada sin el tratamiento adecuado.

Las vinazas del tequila contienen sólidos provenientes de la fibra de agave, levaduras agotadas, azúcares no fermentables, minerales, alcoholes superiores, aldehídos y cetonas, entre otros (**Ríos-Gutiérrez et al.** ^[37]). Su aspecto es de color marrón y espeso, con un aroma acaramelado y parecido al del Tequila. Estudios recientes han demostrado que la DA es un proceso viable y conveniente para poder tratar las vinazas del Tequila (**Méndez-Acosta et al.** ^[26]; **Jáuregui-Jáuregui et al.** ^[19]; **Fregoso-Sánchez et al.** ^[15]).

El proceso de DA de las vinazas de la industria tequilera, podría simularse en el modelo PSM, mediante la existencia de una caracterización más detallada, sobre el

porcentaje de carbohidratos, proteínas, alcoholes, grasas, compuestos inorgánicos insolubles y sólidos volátiles. Cabe destacar que existe una gran cantidad de información acerca del proceso de DA para las vinazas del Tequila, como por ejemplo; el volumen del biorreactor, el HRT, la producción de biogás, la temperatura del proceso, la velocidad de carga del sustrato al digestor anaerobio y algunas caracterizaciones e información de las condiciones experimentales en la [Tablas 3.4](#) y la [Tabla 3.5](#) respectivamente.

Tabla 3.4 Caracterización de las vinazas de Tequila (Zarate, M. ^[50]).

Parámetro	Composición
DBO (g/L)	35-60
DQO (g/L)	60-100
ST (g/L)	25-50
SST (g/L)	2-8
pH (g/L)	3.4-4.5
Nitrógeno (mg/L)	20-50
Calcio (mg/L)	200-1100
Potasio (mg/L)	150-650
Magnesio (mg/L)	100-300
Zinc (mg/L)	<1
Hierro (mg/L)	<45

Tabla 3.5 Condiciones de operación para la adquisición de datos experimentales (Zarate, M. [50]).

Punto	Tiempo de operación (d)	DQO Total en el influente ($\frac{Kg}{m^3}$)	TRH (d)	CVA ($\frac{Kg}{m^3.d}$)
1	34	20	5	4
2	21	20	4	5
3	34	20	3	6.66
4 ^a	50	20	2	10
4b	33	20	2	10
5	33	25	2	12.5

Por ello, este tema queda como una vereda abierta para un desarrollo futuro de investigación que implemente la simulación rigurosa para la DA de las vinazas del Tequila aplicando el modelo PSM.

También se abre un mundo de posibilidades de éxito hacia la simulación rigurosa de plantas de generación de biogás y biodiesel. Tal propósito se lograría con información específica y detallada de parámetros, cinéticas de reacción, propiedades

termodinámicas de compuestos no reportados en la literatura, condiciones de operación y muchas más variables de estos procesos.

CAPÍTULO 4

Simulación Rigurosa de la DA por Dinámica de Fluidos Computacional

Resumen

En este capítulo se presenta el estudio preliminar de CFD mediante el software **ANSYS Fluent**. Se considera como caso de estudio un biorreactor empleado para la digestión anaerobia de las vinazas de Tequila. En primer lugar, se describe el caso de estudio. A continuación existe una breve introducción al flujo turbulento y se presenta la configuración geometría del caso de estudio. Posteriormente se implementa el caso de estudio en **ANSYS Fluent**. Finalmente se presenta una discusión de los resultados que se obtienen.

4.1 INTRODUCCION A LA DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La Dinámica de fluidos computacional (CFD) es una herramienta que puede ayudar a predecir el comportamiento de los patrones de flujo que ocurren en un proceso. La CFD utiliza las ecuaciones de Navier-Stokes, modelos de turbulencia; así como métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas sobre el flujo de sustancias en cualquier geometría.

Las bases de la CFD es la descripción de los regímenes de flujo en un proceso, en particular, el régimen de flujo turbulento, el cual presenta retos interesantes para su estudio debido a la complejidad de su descripción matemática y su fenomenología.

La turbulencia es un tema importante en procesos debido a que casi todos los flujos que se encuentran en ingeniería de procesos son turbulentos. A pesar de la complejidad de la turbulencia, es un tema que debe estudiarse y apreciarse. Para la solución de problemas industriales no se pueden obtener resultados analíticos satisfactorios, ya que estos problemas se tratan utilizando una combinación de análisis dimensional y datos experimentales.

Mientras el flujo laminar es ordenado, el flujo turbulento es caótico. En flujos turbulentos las variables en las ecuaciones que definen el movimiento del fluido tales

como la velocidad, presión, densidad y temperatura fluctúan de forma aleatoria, no son periódicas ni repetitivas, ocasionando movimientos violentamente fluctuantes que se presentan en el flujo turbulento (ver Figura 4.1). Si las condiciones de contorno que gobiernan el problema son estacionarias, se puede esperar que el valor medio de las variables turbulentas también lo sean. Este hecho ha motivado a desarrollar un enfoque estadístico de la turbulencia.

Figura 4.1 Coexistencia de diferentes regímenes en un flujo.

Con el paso de los años se ha perfeccionado el estudio computacional, pasando de los métodos basados en las ecuaciones promediadas de Reynolds, hasta la simulación numérica directa (DNS). Con el rápido avance de la CFD, así como la mejora de los algoritmos de resolución computacional en flujos de fluidos, se ha abierto un panorama muy amplio para el estudio sistemático de la turbulencia en procesos industriales.

Los modelos de simulación computacional principales para flujos turbulentos son los siguientes:

- ❑ Modelos Clásicos: Basados en las ecuaciones de Reynolds (Ecuaciones de Navier–Stokes promediadas en el tiempo).
 - Modelos de cero ecuaciones – Modelo de la longitud de mezcla.
 - Modelos de dos ecuaciones – Modelo k - ϵ , k - ω , k - ϵ realizable.
 - Modelos de esfuerzos de Reynolds (RSM).
- ❑ Simulación de Grandes Remolinos (LES, "Large Eddy Simulation").
- ❑ Simulación Numérica Directa (DNS, "Direct Numerical Simulation").

Los modelos clásicos forman parte en la base de los cálculos turbulentos en los códigos comerciales de CFD. La DNS, simula directamente todo el campo de fluido a partir de las ecuaciones de Navier–Stokes sin ningún tipo de promediado.

Los métodos LES y DNS para la turbulencia, continúan en etapa de investigación; ya que los cálculos son todavía demasiado costosos para merecer algún tipo de consideración para propósito computación actual. En la mayoría de los propósitos en ingeniería no es necesario resolver a detalle las fluctuaciones turbulentas; normalmente sólo se buscan los efectos de la turbulencia en el flujo medio.

4.2 DESCRIPCION Y GEOMETRIA DEL CASO DE ESTUDIO

Se considera un digestor anaerobio cilíndrico de flujo ascendente, para el tratamiento de las vinazas de Tequila, el cual pertenece al Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería (CUCEI) en Guadalajara, Jalisco. La agitación por flujo ascendente y agitación mecánica en los reactores anaerobios asegura la homogeneidad del pH, la temperatura y el desprendimiento de los gases generados en el biorreactor. Se ha observado que una agitación adecuada mantiene un mayor contacto de las bacterias con el sustrato, lo cual conlleva al crecimiento de la biomasa microbiana y mejorar la eficiencia global de la remoción de la materia orgánica.

La primera etapa de una simulación por CFD consiste en definir la geometría del caso de estudio y realizar el mallado correspondiente. La **Figura 4.2** muestra las dimensiones geométricas y especificaciones del biorreactor. Las vinazas de Tequila ocupan 90% del volumen total del digestor. El espacio entre la tapa y el volumen restante se considera que está lleno de biogás.

Equipo:

- Material de fabricación y equipamiento: Policloruro de Vinilo Clorado (CPVC) equipado con chaqueta de calentamiento.
- Volumen total del biorreactor es 3.38 litros, de flujo ascendente y con recirculación.
- El diámetro interno: 1.4 cm y diámetro externo: 1.7 cm en todas las entradas y salidas del biorreactor.

Figura 4.2 Dimensiones del reactor anaerobio para el análisis CFD. Diagrama del reactor para el tratamiento de las vinazas de Tequila.

Con base a las dimensiones de la geometría real presentada en la Figura 4.2, la Figura 4.3 presenta el diagrama construido en el software **SolidWorks**.

Figura 4.3 Diagrama del digestor anaerobio para el tratamiento de las vinazas del Tequila dibujado en SolidWorks.

4.3 MODEALDO DE FLUJO EN CFD

4.3.1. Consideraciones del modelo.

Para la simulación del reactor anaerobio es necesario emplear un modelo matemático para simular los campos de flujo. Se considera que las vinazas de Tequila en el biorreactor se comportan como fluido Newtoniano que estará regido por las ecuaciones de Navier-Stokes y el fluido se comporta laminar.

Así, las restricciones para el modelado y la simulación en CFD son:

- ❑ El fluido es incompresible y fluido Newtoniano isotérmico.
- ❑ El flujo en el reactor es estacionario y en 3 dimensiones.
- ❑ El modelo de flujo se limita a no considerar la transferencia de calor, debido a que la temperatura en el reactor anaerobio es constante: 30°C.
- ❑ Se considera una sola fase en el fluido despreciando la carga orgánica y las burbujas generadas en fluido.

4.3.2. Ecuaciones de continuidad y movimiento.

Para la simulación del caso de estudio en CFD se parte de dos ecuaciones fundamentales: la ecuación de continuidad y la ecuación de cantidad de movimiento.

- ❖ Ecuación de Continuidad. En su forma de notación tensorial.

$$(\rho v_i)_{,i} = 0 \quad (4.1)$$

Donde ρ es la densidad del fluido y v_i es la velocidad del fluido en forma de tensor.

- ❖ Ecuación de Movimiento. La conservación de momento en la dirección i , está dada por:

$$\rho v_{j,i} v_i = -P_{,j} + \tau_{ij,i} + \rho F_j \quad (4.2)$$

Donde P es la presión estática, τ_{ij} tensor de esfuerzos cortantes y ρF_j Fuerza gravitacional en la dirección i . El tensor de esfuerzos cortantes τ_{ij} , se expresa:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.3)$$

Donde μ es la viscosidad molecular del fluido.

4.3.3. Modelo de turbulencia (k - ε) standard.

Los modelos de turbulencia de 2 ecuaciones son los más utilizados en problemas CFD industriales. Se resuelven dos ecuaciones de transporte que modelan las tensiones de Reynolds basado en el enfoque viscosidad de remolino. La robustez, economía y precisión razonable para una amplia gama de flujos turbulentos explican su popularidad de uso industrial y simulaciones de transferencia de calor. Los modelos de dos ecuaciones han sido los modelos más populares para una amplia gama de análisis en ingeniería e investigación. Estos modelos proporcionan ecuaciones de transporte independientes, tanto para la escala de longitud de turbulencia y energía cinética turbulenta. Estos modelos están limitados en los flujos en que las consideraciones fundamentales no son groseramente violadas.

La mayoría de estos modelos hacen la misma suposición fundamental de equilibrio local de producción y disipación turbulenta. Este supuesto implica, que las escalas de la turbulencia son localmente proporcionales a las escalas del flujo medio; por lo tanto, la mayoría de los modelos de dos ecuaciones estarán en error cuando se aplica a los flujos en desequilibrio. Sin embargo estos modelos siguen siendo populares y se pueden utilizar para dar buenos resultados en ingeniería cuando se aplica a casos apropiados (Celik, I. ^[11]).

El modelo semi-empírico k - ε de Launder et al. ^[21] es el modelo de turbulencia de dos ecuaciones de transporte más utilizado; para la energía cinética turbulenta (k) y su tasa de disipación turbulenta (ε). k y ε se tienen las dos siguientes ecuaciones,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4.5)$$

G_k y G_b es la generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad y flotabilidad. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ son constantes. σ_k y σ_ε son los números turbulentos de Prandtl.

La viscosidad turbulenta (μ_t) se calcula combinando k y ε de la siguiente forma (C_μ es constante),

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.6)$$

Las constantes del modelo: $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, σ_k y σ_ε tienen los siguientes valores empíricos (Launder et al. ^[21]):

$$C_{1\varepsilon} = 1.44, \quad C_{2\varepsilon} = 1.92, \quad C_\mu = 0.09, \quad \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_\varepsilon = 1.3$$

La desventaja de todos los modelos k- ε , es su insensibilidad a los gradientes de presión adversos y la separación de la capa límite. Por lo general predicen una separación retrasada y reducida con respecto a las observaciones experimentales. Lo cual conlleva a evaluaciones de diseño demasiado optimistas para los flujos que se separan de las superficies lisas (cuerpos aerodinámicos, difusores, etc.); por ello el modelo k- ε no se utiliza con regularidad en la aerodinámica externa. **ANSYS Fluent** recomienda otras variantes de la familia k- ε , como el uso del modelo k- ε Realizable, además de la combinación con el Mejoramiento en el Tratamiento de Pared (**Enhance Wall Treatment**).

4.3.4. Modelos RANS para tratamiento en la pared en ANSYS Fluent (Enhance Wall Treatment).

La mayoría de los flujos de interés en ingeniería, implican situaciones en que la corriente se ve limitada, en cierto grado, por el contacto de un sólido. En condiciones de frontera en la pared es algo común usar métodos apropiados para aplicarse con modelos de dos ecuaciones.

Se recomienda usar tratamiento de pared para todos los modelos disponibles de turbulencia (ecuación- ε y ecuación- ω) y en fluidos de una sola fase. Esto mejora consistentemente el esfuerzo cortante en la pared y la predicción de la transferencia de calor en la pared con menos sensibilidad para valores y^+ .

En caso de que las funciones en la pared sean usadas, es necesario usar mallas con espaciamiento fino cerca de la pared. Esto se recomienda para usarse $y^+ > 30$ en todo el dominio. Las funciones de la pared son especialmente dañinas para los flujos de bajo número de Reynolds ($Re \sim 10^4$ - 10^6), ya que se asume que una capa logarítmica extendida no es válida en estos casos.

4.4 SIMULACION POR CFD DE UN DIGESTOR ANAEROBIO TRATANDO VINAZAS DEL TEQUILA

4.4.1. Inicio de ANSYS Fluent.

El Software comercial CFD, **ANSYS Fluent** versión 14.0, se utiliza para simular los campos de flujo en el reactor anaerobio.

Para iniciar el modelado y simulación por este programa, se inicia con la creación del sistema de análisis de fluido como sigue. En **Analysis Systems** se elige el módulo **Fluid Flow (Fluent)**. En este paso se hace lo siguiente:

- Seleccionar el modulo, arrastrar y soltar en el esquema de proyecto (zona blanca), ver **Figura 4.4**. Esto crea un sistema de análisis **Fluid Flow (Fluent)**.

Figura 4.4 Selección del sistema de análisis en Workbench.

Figura 4.5 Nuevo sistema de análisis Fluid Flow (Fluent) en Workbench.

- b) Se selecciona la pestaña **Fluid Flow (Fluent)** y se introduce el nombre **"REACTOR ANAEROBIO"** como nombre del sistema de análisis (Figura 4.5).
- c) En el menú Archivo se selecciona la opción **"Save as..."**. Se direcciona el archivo a la carpeta de trabajo y se introduce un nombre específico para el proyecto.

ANSYS Workbench se compone de múltiples bases de datos individuales en un mismo proyecto. Se puede obtener datos de otras celdas y proporcionar datos a otras. Esto hace que el estado de una celda cambie. Se indica el estado visual de una celda a través de iconos en la parte derecha de cada celda. Una breve descripción de los diversos estados se proporciona a continuación:

- **Obligatorio actualizar** (🔄) indica que los datos de la celda de arriba han cambiado en la última modificación de datos.
- **Atención necesaria** (⚠️) los datos de arriba han pasado a la celda de abajo, sin embargo, se debe tomar algún tipo de acción para seguir. Seguramente requiere datos adicionales que se deben introducir en la celda anterior, antes de calcular una solución.
- **Actualización Requerida** (⚡) indica que los datos en esa celda han cambiado y esa celda debe ser regenerada o actualizada.
- **Actualizado** (✅) indica que la actualización se ha realizado en la celda sin producir errores o que el cálculo en las iteraciones se completó con éxito.
- **Interrumpida** (❌) indica que se ha interrumpido una actualización o se canceló un cálculo interactivo que está en curso.

- **Entrada con cambios pendientes** (🟡) indica que la celda está actualizada, pero podría cambiar en la próxima actualización, como resultado de los cambios realizados en celdas de arriba.
- **Pendiente** (🔴) indica que una solución no está sincronizada. Cuando una celda está en estado pendiente, se puede interactuar con otras celdas del proyecto.

4.4.2. Geometría.

En **ANSYS DesignModeler** se puede crear una geometría o importar el archivo de geometría pre-existente que sea adecuada y compatible. En este paso, se va a crear la geometría del reactor anaerobio en 3-D en el programa de Diseño Asistido por Ordenador (CAD) **SolidWorks** y posteriormente importar esta geometría al sistema de análisis.

En **ANSYS DesignModeler** se selecciona el sistema de unidades de longitud a trabajar. La geometría está construida en centímetros y se selecciona el análisis CFD usando unidades del SI. Enseguida se realizan los siguientes pasos:

- a) Se seleccionan centímetros como unidad de medida deseada y **OK** para cerrar la ventana.

Figura 4.6 Selección de unidades en **ANSYS DesignModeler**.

- b) Para importar la geometría, se elige la celda de **Geometry** y se selecciona "Import External Geometry File..."; y finalmente se elige el archivo que contiene a la geometría construida en **SolidWorks**.
- c) Por último se selecciona el botón **Generate** (ver Figura 4.7).

Figura 4.7 Geometría externa importada a **ANSYS DesignModeler**.

La Figura 4.7 consta de una tubería de entrada, una salida y una recirculación de fluido.

d) Para cerrar, se selecciona **File → Close DesignModeler**.

Cabe destacar que **ANSYS Workbench** guarda automáticamente la geometría y actualiza el esquema del proyecto. El signo de interrogación en la celda **Geometry** se sustituye por una marca de actualización (✓), lo que indica que hay una geometría válida.

4.4.3. Mallado.

Una vez que se cargó la geometría, es necesario generar una malla computacional para todo el volumen de flujo. Para esta acción, se utilizará la aplicación **ANSYS Meshing** para crear una malla, la cual se empleará en el análisis CFD.

Se observa que el icono Actualizar Obligatorio (🔄) apareció en la celda **Mesh** (véase la Figura 4.8). Esta celda requiere una actualización y los datos de la celda anterior han cambiado, debido a que se ha cargado la geometría en la celda **Geometry**.

En el proyecto se realiza lo siguiente:

- a) Carga de la malla: Se selecciona la celda de **Mesh**, celda A2. Esto despliega la aplicación **ANSYS Meshing** con la geometría del biorreactor cargada, como se muestra en la **Figura 4.9**.

Figura 4.8 Carga de la geometría en CFD Ansys Fluent.

Figura 4.9 Geometría cargada en ANSYS Meshing.

- b) Etiquetas de la geometría. Con el fin de simplificar el trabajo en **ANSYS Fluent**, se deben de etiquetar las caras en la geometría mediante la creación de selecciones temporales en la entrada y salidas de las tuberías de la geometría; así como la superficie del reactor. Los límites de las paredes

exteriores e interior del reactor son detectados automáticamente por **ANSYS Fluent**. Para este fin se realiza lo siguiente:

- (i) Se selecciona la entrada, salida y recirculación en la geometría del biorreactor.
- (ii) Se utilizan los botones de la barra de herramientas de gráficos y el ratón para manipular la imagen hasta que se pueda ver fácilmente las aberturas de las tuberías y superficie, y poder seleccionar cada una de las zonas de nuestro interés.
- (iii) Se selecciona la opción de **Create Named Selection** (ver la **Figura 4.10**). Esto muestra el cuadro de diálogo **Selection Name** (ver **Figura 4-11**) de la cara que ha sido seleccionada.
- (iv) Se introduce el nombre "entrada" (cara por la cual entra el fluido) y se selecciona **OK**. Por último se realiza la misma operación para nombrar las caras restantes:

- Flujo másico de salida del fluido "**salida**".
- Flujo másico de recirculación de fluido "**recirculación**".
- Presión en la superficie del fluido "**superficie**".
- Superficies restantes del reactor "**paredes del reactor**".

Figura 4.10 Selección de los nombres en las caras del biorreactor.

Figura 4.11 Creando los nombres en las zonas de interés.

- c) Ajuste del mallado: En este paso se ajustan varios parámetros de mallado para obtener una malla mucho más fina. El procedimiento es como sigue:
- (i) Se selecciona **Mesh**, la cual se ubica por debajo **Project/Model**, para visualizar los detalles de "**Mesh**".
 - (ii) La aplicación ANSYS Meshing detecta automáticamente que se va a realizar un análisis CFD, las preferencias físicas y el **solver** se establecen por default.
 - (iii) Se despliega la ventana de **Sizing** de malla dando clic en el símbolo "+", para que aparezcan los parámetros para la modificación del tamaño de la malla.
 - (iv) En la opción **Relevance Center** se selecciona **Fine**, en lugar del valor por default **Coarse**.
 - (v) En **Smoothing** se cambia a **High**. En la **Curvature Normal Angle** se cambia a **10°** (véase la Figura 4.12).

Figura 4.12 Cambios de parámetros del tamaño del mallado.

d) Control del tamaño del mallado.

- (i) Con el icono ( ) que se encuentra en la barra de herramientas de gráficos, se selecciona todo el cuerpo del biorreactor. Se selecciona **Insert** → **Sizing** (ver la Figura 4.13a).
- (ii) Mediante el paso anterior aparece un control de **Body Sizing** debajo de **Mesh** en el esquema del proyecto. Se selecciona este nuevo control para indicarle un **Element size** de $6e-3$ (Figura 4.13b).
- (iii) Como último paso se selecciona **Mesh** y se expande el nodo de **Inflation** para desplegar los parámetros. Se cambia **Use Automatic Inflation** por **Program Controlled**.

Figura 4.13 Control de tamaño de malla. (a) Control de mallado con la herramienta **Sizing**, (b) Celda donde introducimos el valor deseado.

e) Generación de malla.

- (i) Se selecciona **Mesh** en el esquema de proyecto y posteriormente en **Generate Mesh** (ver la Figura 4.14). Una vez que se ha generado la malla para el reactor, es posible consultar las estadísticas de malla.

- (ii) Se abre el nodo de **Statistics** en los detalles de la malla, **Details of Mesh**. En este menú se puede consultar la información del número de nodos y elementos.
- (iii) Los pasos anteriores conducen a un valor de **skindenes** de 0.85, que según la literatura se considera una malla de buena calidad. Además aparece el número de nodos y elementos que contiene la malla. El método que se empleará para resolver la malla se hará por método de elemento finito.
- (iv) Para terminar esta parte se cierra la aplicación **ANSYS Meshing**.

El icono obligatorio actualizar (🔄) aparece en la celda de **Setup**, mientras en la celda de **mesh** aparece el símbolo **Actualizado** (✅); esto indica que existe una malla en el sistema de análisis.

Figura 4.14 Malla computacional de la geometría del reactor en ANSYS Meshing.

4.4.4. Inicio de la simulación.

Una vez que se crea la malla computacional en la geometría, se introducen los datos necesarios para realizar la configuración del análisis CFD en **ANSYS Fluent**.

- a) Inicio: En el proyecto se selecciona la celda **Setup**. Aparece un cuadro de diálogo para seleccionar las opciones de arranque en **ANSYS Fluent** (ver la **Figura 4.15**). Está permite decidir la versión que se usará en **ANSYS**

Fluent, dependiendo de la geometría y las capacidades de procesamiento de nuestra computadora. Verifique que todas las opciones estén habilitadas. La opción **Double Precision** debe estar deshabilitada y la opción de procesamiento se hará en **serial**. Se selecciona **Aceptar** para iniciar **ANSYS Fluent** (ver Figura 4.16). Se observa la malla cargada automáticamente en la ventana de gráfico.

Figura 4.15 FLUENT Launcher.

Figura 4.16 Aplicación ANSYS Fluent.

- b) Método de solución: En el panel **problem setup**, se selecciona **General** (ver la **Figura 4.17**) para realizar las actividades relacionada con la malla y elegir un **Solver** de solución.

Figura 4.17 Selección de parámetros generales.

- c) Definición de unidades: Se especifican las unidades de longitud en centímetros. **ANSYS Fluent** convierte y exporta mallas usando automáticamente la unidad de longitud en metros, independientemente de las unidades de nuestra geometría. En el botón de **Units**, se cambian las unidades de metros a centímetros (ver **Figura 4.18**). Se selecciona longitud de la lista de **Quantities**, posteriormente en la lista **Units** se selecciona **cm**. Se cierra el cuadro de diálogo con **Close**.

Figura 4.18 Cuadro de diálogo **Set Units**.

- d) Comprobación de malla: Al activar el botón **Check**, **ANSYS Fluent** se proporciona información de los resultados al verificar la malla. Estos datos

aparecen en la pantalla principal de Fluent. Los datos siguientes corresponden al caso de estudio:

```

Domain Extents:
x-coordinate: min (m) = -1.000000e+00, max (m) = 1.000000e+00
y-coordinate: min (m) = 0.000000e+00, max (m) = 3.860000e+00
z-coordinate: min (m) = -5.000000e-01, max (m) = 5.000000e-01
Volume statistics:
minimum volume (m3): 2.649646e-08
maximum volume (m3): 3.183458e-04
total volume (m3): 3.005084e+00
Face area statistics:
minimum face area (m2): 1.378293e-05
maximum face area (m2): 9.762145e-03
Checking mesh.....
Done.

```

Los valores máximos y mínimos varían ligeramente en cada corrida o diferente plataforma. En el análisis de la malla se enlistan los valores *x-máximos* y *x-mínimos* en unidades del SI. También informa otras características de malla que estén seleccionadas. Si la malla presenta un error, será reportado en este paso. Cuando existen valores negativos de **minimum volume** en la malla, no será posible iniciar un cálculo cuando se presente este caso.

4.4.5. Selección de régimen de flujo.

Para la decisión del modelo, ya sea laminar o turbulento, se toma en cuenta el comportamiento del fluido con respecto a la geometría, la velocidad de agitación y de sus propiedades físicas; como la densidad y viscosidad del fluido.

El flujo másico de entrada de vinazas de Tequila será función de la tasa máxima de crecimiento de las bacterias metanogénicas, cuyo valor esta reportado en **Zárate, M.** [49] y este valor es $\mu_{Met}^{max} = 0.571 d^{-1}$. Se sabe que en estado estacionario se cumple la siguiente relación:

$$\mu_{Met}^{max} = D_{max} = \frac{F_{Vinazas}}{V_{Reactor}}$$

Donde D_{max} es la tasa de dilución (d^{-1}), $F_{Vinazas}$ es el flujo volumétrico de vinazas a la entrada del biorreactor (m^3/s) y $V_{Reactor} = 0.003007 m^3$ corresponde al volumen del biorreactor. Para obtener el flujo másico de vinazas en la entrada,

despejamos el flujo de vinazas y posteriormente multiplicar por la densidad del agua a 35 °C; es decir:

$$\dot{m}_{\text{vinazas}}^{\text{Entrada}} = F_{\text{vinazas}} \cdot \rho_{\text{Agua}}^{35^{\circ}\text{C}} = (2 \times 10^{-8} \text{ m}^3/\text{s})(999 \text{ Kg}/\text{m}^3) = 2 \times 10^{-5} \text{ Kg}/\text{s}$$

La variación de la recirculación de las vinazas en el biorreactor se hará en base a lo reportado en la literatura, 1 a 6 veces lo que se alimenta. Esta será la base para comparar todos los posibles escenarios y poder visualizar que relación muestra un mejor mezclado dentro del biorreactor. Para estos fines se genera la siguiente **Tabla 4.1**.

Tabla 4.1 Valores de flujo másico recirculación/alimentación en el biorreactor.

Relación:	Valor
Recirculación: Alimentación	
1 a 1	$2 \times 10^{-5} \text{ Kg}/\text{s}$
2 a 1	$4 \times 10^{-5} \text{ Kg}/\text{s}$
3 a 1	$6 \times 10^{-5} \text{ Kg}/\text{s}$
4 a 1	$8 \times 10^{-5} \text{ Kg}/\text{s}$
5 a 1	$1 \times 10^{-4} \text{ Kg}/\text{s}$
6 a 1	$1.2 \times 10^{-4} \text{ Kg}/\text{s}$

Para habilitar el modelo **laminar o turbulento k-epsilon** para el comportamiento del fluido en el biorreactor se siguen los siguientes pasos.

- Se activa la opción **Models** → **Viscous – Laminar**. Posteriormente dar clic en el botón **OK**, para cerrar el cuadro de diálogo (ver **Figura 4.19**).

Figura 4.19 Selección de los modelos que regirán la simulación.

4.4.6. Selección de fluido.

Con la finalidad de realizar una mejor aproximación en la simulación de los patrones de flujo dentro del biorreactor para el tratamiento de las vinazas de Tequila, es necesario conservar las propiedades físicas que representen los valores reales en la experimentación y operación del biorreactor. Suponiendo y simplificando que las vinazas están compuestas mayormente por agua, y que las bacterias que intervienen en el proceso, su composición másica representan un elevado porcentaje de contenido de agua; se decide emplear las propiedades puras del agua que a continuación se presentan.

Tabla 4.2 Propiedades físicas del Agua. Fundamentos de momento, calor y masa. J., Welty. Apendice 1. Pag. 845. Ed. LIMUSA.

Propiedades	Valores
Temperatura	35 °C
Densidad (ρ)	999 Kg/m ³
Calor especifico (C_p)	4216 J/Kg·°K
Viscosidad (μ)	0.00072 Kg/m·s
Conductividad Térmica (κ)	0.7 W/m·°K

- a) Se selecciona **Materials**, del menú **Problem Setup**. Enseguida aparece la **Figura 4.20**. El propósito en este paso, es seleccionar el fluido con el que se compone la geometría cargada en la celda **Geometry**.

Figura 4.20 Fluidos y materiales llamados de la base de datos en **Fluent**.

- b) Se selecciona **Create/Edit**, y aparece la **Figura 4.21**.

Figura 4.21 FLUENT Database Materials.

- c) En este nuevo cuadro de diálogo, se selecciona **Database FLUENT**, y se selecciona el agua: **Material Type** → **Fluid** → **water-liquid**. Se introduce los valores de la tabla en el cuadro de grupo de propiedades. Enseguida se selecciona **Copy** y por último se selecciona **Close**.

4.4.7. Condiciones de frontera y de contorno para la simulación.

Para establecer las condiciones de las zonas de elementos del fluido se procede como sigue.

- Se selecciona **Fluid** del cuadro de diálogo **Cell Zone Conditions**, se selecciona **Edit...** para abrir el cuadro de diálogo **Fluid** (ver Figura 4.22).
- Se selecciona **water-liquid** de la lista desplegable **Material Name** (ver Figura 4.23). Por último se selecciona el botón OK para cerrar el cuadro de diálogo.

Figura 4.22 Selección del tipo de fluido para los elementos que componen al reactor.

Figura 4.23 Designación al elemento el tipo de fluido que lo compone.

El procedimiento para establecer las condiciones de frontera en las caras que contienen un nombre de selección es como sigue (ver Figura 4.24).

Figura 4.24 Condiciones de frontera.

Condiciones frontera de entrada:

- Se selecciona **Boundary Conditions** → **Mass Flow-inlet** → **entrada** → **Edit....**
- Mediante este paso se tiene acceso al cuadro de diálogo de **Mass-Flow Inlet**. **ANSYS Fluent** tiene una opción para establecer flujo másico, como condición de frontera en la cara seleccionada **entrada** de la geometría del biorreactor.
- La dirección del flujo másico en la **entrada**, se define normal al flujo en la frontera. La geometría del caso de estudio es 3-D y se seleccionan coordenadas

cilíndricas. La dirección del flujo en la **entrada** será tangencial (véase la **Figura 4.25**).

Figura 4.25 Condición de frontera en la entrada de fluido al reactor.

- d) Se selecciona **Mass Flow Rate** de la lista desplegable **Mass Flow Specification Method**. Se introduce el valor de 0.00012 en **Mass Flow Rate (Kg/s)**.
- e) En **Direction Specification Method** se selecciona **Direction Vector** y **Cylindrical (Radial, Tangential, Axial)** de la lista desplegable **Coordinate System**.
- f) En **Tangential-Component of Flow Direction** se introduce el valor "1", posteriormente se conserva el valor predeterminado "0" para **Radial-Component** y **Axial-Component of Flow Direction**.

Condiciones frontera de salida: Las condiciones de frontera para flujo de salida en **Fluent** se utilizan para modelar las salidas de flujo, donde los detalles de la velocidad de flujo y la presión no son conocidos con anterioridad a resolver el problema de flujo. En **Fluent**, es posible utilizar múltiples límites (zonas) de flujo de salida y especificar la parte fraccional de flujo que saldrá a través de cada límite de salida.

- a) Se selecciona **Boundary Conditions** → **Outflow** → **salida** → **Edit...**
- b) En el cuadro de diálogo **Flow Rate Weighting** (Caudal de Ponderación), se establece que fracción de flujo de entrada se dividirá en las condiciones de

frontera de salida del caso de estudio (**salida** y **recirculación**). El **Flow Rate Weighting** se expresa de la siguiente forma:

$$\text{Percentage flow through boundary} = \frac{\text{Flow Rate Weighting Specified on boundary}}{\text{Sum of all Flow Rate Weighting}} \quad \dots (4.7)$$

- c) Por default, **Flow Rate Weighting** establece el valor de 1.0 para todas las fronteras de salida. Si el flujo se divide en partes iguales entre todos los límites de salida o si existe sólo una salida, no es necesario cambiar este valor (ver la **Figura 4.26**). Para el caso de estudio se varían las fracciones de flujo para la salida y la recirculación. Por ejemplo, si se desea que el 50% de la corriente de entrada salga por la frontera de **salida** y el otro 50% por la frontera de **recirculación** se tiene una relación salida/recirculación (1:1), entonces se aplican las siguientes relaciones de la **Ecuación (4.7)**:

$$\text{Condición de frontera recirculación} = \frac{1.0}{1.0 + 1.0} = 0.5 \text{ o } 50\%$$

$$\text{Condición de frontera salida} = \frac{1.0}{1.0 + 1.0} = 0.5 \text{ o } 50\%$$

Con estos valores **Fluent** escalará las fracciones de caudal proporcionales para obtener fracciones iguales a través de las dos fronteras de salida. Se debe establecer condiciones de reflujo razonables para evitar que la convergencia tenga repercusiones negativas. En la **Tabla 4.3** se presentan los valores de ponderación que se usarán para las simulaciones según las relaciones salida/recirculación.

Figura 4.26 Diagrama del reactor donde se expresan los valores de flujo másico.

Tabla 4.3 Porcentajes de ponderación de flujo para las fronteras de salida.

Relación salida/recirculación	Alimentación (Kg/s)	Salida (Kg/s)	Recirculación (Kg/s)	Porcentaje de flujo a través de la frontera de salida	Porcentaje de flujo a través de la frontera de recirculación.
1:1	0.00004	0.00002	0.00002	$\frac{0.00002}{0.00004} = 0.5$	$\frac{0.00002}{0.00004} = 0.5$
1:2	0.00006	0.00002	0.00004	0.3333	0.6666
1:3	0.00008	0.00002	0.00006	0.25	0.75
1:4	0.0001	0.00002	0.00008	0.20	0.8
1:5	0.00012	0.00002	0.0001	0.1666	0.8333
1:6	0.00014	0.00002	0.00012	$\frac{0.00002}{0.00014} = 0.1429$	$\frac{0.00012}{0.00014} = 0.8571$

Condiciones frontera de superficie: En la parte superior del biorreactor se maneja una presión de cabeza un poco superior a 1 atm. Además existe una interface de un nuevo fluido que se genera en el mismo biorreactor, en este caso es el biogás; el cual está compuesto por CO₂ y CH₄. Para fines prácticos se considera que esta interface no afecta relativamente el comportamiento del fluido en toda la superficie debido a su bajo esfuerzo cortante entre el fluido y la interface gas.

- Se selecciona **Boundary Conditions** → **Pressure Inlet** → **superficie** → **Edit...**
- Se introduce 101325 (1 atm) para **Gauge Total Pressure (pascal)**. Se selecciona **OK** para cerrar el cuadro de diálogo (ver **Figura 4.27**).

Figura 4.27 Condición de frontera en la superficie del reactor. (Cambiar imagen de fluido Laminar)

4.4.8. Corriendo la simulación.

En los pasos que siguen se va a configurar y ejecutar el cálculo utilizando los módulos de trabajo bajo el título de **Solution** en el panel de navegación.

Para examinar los criterios de convergencia para los residuos de las ecuaciones se sigue el siguiente procedimiento.

- Se selecciona **Residuals Monitors** → **Edit...**
- Se mantienen los valores establecidos para los criterios absolutos de convergencia, como se muestra en el cuadro de diálogo **Residual Monitors**, **Figura 4.28**. Se selecciona **OK** para cerrar este cuadro de diálogo.

Figura 4.28 Criterios de convergencia para las ecuaciones.

Para establecer el método de solución e iniciarla se sigue el siguiente procedimiento.

- Se selecciona **Solution Methods**.

Figura 4.29 Cuadro de diálogo **Solution Methods**.

El algoritmo **SIMPLE** utiliza una relación de correlaciones entre velocidad y presión para hacer cumplir la conservación de la masa y para obtener el campo de presión. Es un procedimiento numérico ampliamente utilizado para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. **SIMPLE** es un acrónimo de Método semi-implícito para las ecuaciones relacionadas con la presión.

- b) En la sección **Spatial Discretization** del panel de **Solution Methods**, se cambia el gradiente a **Green-Gauss Node Based**. Este método de gradiente se sugiere para mallas triangulares y tetraedros.
- c) Se selecciona **Solution Initialization**.

Figura 4.30 Datos iniciales para iniciar la solución.

- d) Se mantiene el valor **Standard Initialization** del cuadro **Initialization Methods**. De la opción **Compute from**, se selecciona **entrada**. Por último se selecciona **Initialize**.
- e) Se selecciona **Run Calculation** → **Check Case**.

Figura 4.31 Advertencias y sugerencias de **ANSYS-Fluent** antes de iniciar la solución.

- f) Se selecciona **Mesh, Models, Boundaries and Cell Zones, Materials y Solver** para examinar las recomendaciones en cada una de las pestañas. En caso que estas recomendaciones requieran tomar alguna medida preventiva en estos sistemas de análisis, será necesario realizar los ajustes necesarios para las advertencias existentes en las celdas correspondientes. Como siguiente paso se cierra este cuadro de diálogo.
- g) Se selecciona **Run Calculation**.

Figura 4.32 Run Calculation.

- h) Se introduce 500 en **Number of Iterations** y se selecciona **Calculate**.

Conforme avanza el cálculo, en el monitor se observa cómo avanzan los perfiles gráficos de cada ecuación (ver la Figura 4.33). La solución será detenida por **Fluent** cuando los residuos lleguen a sus valores especificados o después de 500 iteraciones. El número exacto de iteraciones puede variar dependiendo de la plataforma que se utiliza. Un cuadro de diálogo se abrirá para avisar que el cálculo se ha completado.

Figura 4.33 Residuales para la convergencia de la solución.

No hay indicadores universales para juzgar la convergencia. La solución ha convergido cuando se alcanza el criterio de convergencia para cada variable. El criterio para cada residual es un valor de 10^{-3} y para la energía residual es 10^{-6} . Otra forma de corroborar que la solución ha convergido es que las variables de flujo a través de iteraciones que los residuos se han estancado y no cambian con más iteraciones. Esto también podría ser considerado como convergencia. Se observa que el estado de la celda de solución está actualizada (✓), Figura 4.34.

Figura 4.34 Celda de solución actualizada.

4.4.9. Visualización de resultados.

A continuación los resultados de la simulación en **ANSYS Fluent**, son presentados en **CFD-Post**.

- a) En **Project Schematic**, se selecciona la celda **Results** (celda A6), lo cual despliega la aplicación **CFD-Post**.
- b) La geometría del biorreactor se carga automáticamente y se muestra en modo de contorno. Los archivos de datos también se cargan automáticamente en **CFD-Post** (véase la **Figura 4.35**).

Figura 4.35 Geometría del reactor cargada en **CFD-Post**.

- c) Se cambia la orientación de la pantalla haciendo clic en el eje **Y**, del sistema de coordenadas de la esquina inferior derecha de la pantalla, para orientar la vista de la parte frontal de la geometría del biorreactor.
- d) Se inserta una línea de corriente usando el icono del menú **Insert** → **Streamline** en la parte superior de la ventana CFD-Post. Esto muestra el cuadro de diálogo **Streamline 1** (**Figura 4.36**).

Figura 4.36 Detalles de las líneas de corrientes.

- e) Se mantiene el nombre por default (**Streamline 1**) y se selecciona **OK** para cerrar el cuadro de diálogo. Esto despliega una nueva ventana: **Details of Streamline 1** en CFD-Post.
- f) En la pestaña **Geometry**, se selecciona **All Domains** de la lista **Domains**. De la pestaña **Star From** se elige el dominio **part_1**.
- g) En la lista de **Variable** se selecciona **Velocity** y en **Max Points** se introduce el valor 800. Por último se selecciona **Apply**. Con este paso se despliega en la ventana de gráfico, el biorreactor con las líneas de corriente, ver la **Figura 4.37**.

Figura 4.37 Distribución de la velocidad a lo largo del reactor.

Con este último procedimiento se concluye el estudio CFD de los campos de flujo dentro del biorreactor. Cabe mencionar que la gráfica de la **Figura 4.37** se puede diseñar de diferentes formas, así como el tipo de selección de las variables que se quisieran observar en un análisis. En **CFD-Post** es posible considerar la presentación de diversas variables físicas y de transporte; tales como la presión, temperatura, velocidad, energía cinética turbulenta, energía de disipación turbulenta, entre otras.

En los resultados que se muestran en la siguiente sección se siguen los mismos pasos antes descritos; empleando los diferentes valores de ponderación de los flujos de salida en la condición de frontera de **salida** y **recirculación**. Se debe notar que solo es necesario modificar estos valores de ponderación y ejecutar independientemente cada simulación.

4.5 RESULTADOS DE CFD

La simulación numérica basada en CFD, en **ANSYS Workbench**, se llevan a cabo con el fin de estudiar el comportamiento de la configuración del biorreactor de flujo ascendente para las diferentes relaciones de flujo másico. No se cuentan con datos experimentales para esta configuración, por ello surge la necesidad de estimar un caudal de entrada, salida y recirculación adecuados para un buen mezclado dentro del reactor y mantener un mejor contacto de la materia orgánica con las bacterias; lo cual conlleva a una mayor eficiencia en la digestión para la obtención de biogás; cumpliéndose el principal objetivo de la DA.

La **Figura 4.38** presentan los resultados del análisis por CFD para diferentes relaciones de flujo másico recirculación/ alimentación reportadas en la **Tabla 3.6-B**. Se puede observar de la **Figuras 4.38** que para todas las relaciones de recirculación/alimentación de flujo másico, existe una zona muerta importante en la parte inferior del biorreactor. Además, las líneas de corriente muestran un lento flujo ascendente y un mezclado pobre en el fondo del reactor, lo que provocaría el asentamiento de la materia orgánica de las Vinazas. Además, para todos los casos hay una mínima diferencia en los patrones de flujo. Por lo tanto, se sugiere la relación de 1:1 para ahorrar energía requerida para el bombeo de Vinazas en el funcionamiento del reactor. Los patrones de flujo en el fluido Newtoniano no se ven afectados por el aumento de la velocidad de flujo de entrada, solo pueden mejorar la magnitud de la velocidad en la zona de mezcla, pero no puede cambiar los patrones globales del flujo ni reducir la zona muerta.

Cabe señalar que las concentraciones de biomasa en las vinazas podrían afectar a las propiedades reológicas. En particular, el esfuerzo cortante y la viscosidad pueden aumentar, debido un aumento de la masa sólida en el líquido. Con el fin de mejorar la simulación de CFD en este trabajo, es necesario caracterizar al menos dos de los principales parámetros físicos que afectan el patrón de flujo: la densidad y viscosidad de las vinazas de tequila. También se recomienda realizar simulaciones adicionales con trazadores para caracterizar los tiempos de permanencia de las bacterias y los sustratos que intervienen en el proceso de AD. Finalmente, es deseable comparar los resultados numéricos obtenidos a partir de las simulaciones CFD con los resultados experimentales.

Figuras 4.40 Líneas de corrientes de velocidad en el reactor para diferentes relaciones de flujo másico recirculación/alimentación (a) 1:1, (b) 1:2, (c) 1:3, (d) 1:4, (e) 1:5, (f) 1:6.

CAPÍTULO 5

Conclusiones y Trabajo Futuro

Resumen

En este capítulo se presenta una recapitulación de los resultados principales de este trabajo y se establecen las conclusiones principales del mismo. Se identifican además líneas de investigación abiertas que se pueden seguir a partir de los resultados y conclusiones de este trabajo.

5.1. CONCLUSIONES PRINCIPALES

En este trabajo se ha establecido las ideas generales para realizar estudios de simulación rigurosa en procesos de digestión anaerobia. En particular se identifican las siguientes conclusiones de este trabajo.

5.1.1. Fenomenología de la DA.

La DA es un proceso de gran complejidad debido a la gran cantidad de microorganismos y substratos que participan en las cuatro etapas principales del mismo: (i) Hidrolisis, (ii) Acetogenesis, (iii) Acidogenesis y (iv) Metanogenesis. Cada una de estas etapas consiste en diversas reacciones bioquímicas que se ven afectadas por una gran variedad de factores e incluso de productos de las mismas reacciones. Derivado de los esfuerzos de la comunidad académica de diversas áreas, actualmente, existe mucho conocimiento de la fenomenología de la DA, incluyendo aspectos fundamentales microbiológicos y de las rutas metabólicas. A pesar de esto, la aplicabilidad a la operación práctica de tales conocimientos es escasa, debido a que en general es difícil la caracterización y monitoreo de variables clave relevantes en los digestores anaerobios.

5.1.2. Simulación rigurosa de la DA.

Con la finalidad de mejorar el entendimiento del efecto de diversos factores fundamentales en procesos complejos, como la DA, el modelado y simulación han demostrado ser herramientas muy poderosas. La simulación como herramienta adicional en la DA ayuda a entender los factores físicos, químicos o biológicos que afectan este proceso. Así mismo para fines de competitividad y en la mejora de las condiciones de operación. Por seguridad y/o costos, podría ser difícil o imposible

realizar algunos experimentos en el proceso real. Si existe un modelo adecuado disponible, en lugar de la experimentación pueden hacerse simulaciones a las condiciones deseadas. Los modelos pueden ser útiles para el escalamiento de procesos o para integrar varios sistemas en un proceso más complejo. La simulación realizada con simuladores de procesos es una herramienta muy útil para entender estos efectos, coadyuvar a mejorar el proceso y asegurar una operación segura y eficiente de la planta de proceso. Mediante el uso de modelos matemáticos, simuladores de procesos y la interacción con los ingenieros de proceso, se profundizará en el entendimiento de la operación y desempeño de la planta.

En este trabajo se llevaron a cabo dos estudios de simulación rigurosa de la DA:

- (i) La simulación rigurosa del proceso por medio del simulador comercial Aspen Plus, y
- (ii) La simulación rigurosa de los patrones de flujo en un digestor anaerobio de flujo ascendente sin agitación mecánica.

5.1.3. Simulación rigurosa del proceso de DA con Aspen Plus.

Recientemente se presentó la simulación rigurosa de la DA por medio del simulador de procesos Aspen Plus. En este trabajo se presenta la explicación detallada de la implementación en Aspen Plus para la simulación de la DA y se identifica la información y pasos necesarios para extender su aplicación a otros casos de estudio. La simulación rigurosa de Aspen Plus se basa en el modelo ADM1 de la DA, el cual es el modelo riguroso de la DA más aceptado en la actualidad.

5.1.4. Simulación rigurosa de los patrones de flujo con Ansys Fluent CDF.

Con el aumento de computadoras más rápidas y más poderosas, es posible a un costo relativamente pequeño se pongan a prueba previamente una simulación de los patrones de flujo de un fluido en algún recipiente; lo cual permite tentativamente a predecir las velocidades de entrada y salida del fluido. También es posible observar si existen zonas muertas o baja agitación en toda la zona de fluido. En este trabajo se presentaron las ideas generales de la implementación de un estudio de CFD a un digestor anaerobio. Este estudio proporciona una base sencilla para la comprensión de los principales conceptos involucrados en un análisis CFD, aplicando un modelo de turbulencia $k-\epsilon$ a un fluido de un biorreactor de flujo ascendente para el tratamiento de vinazas de Tequila.

5.2 LINEAS DE INVESTIGACION ABIERTAS

En la literatura son pocas las contribuciones relacionadas a la simulación rigurosa de la DA. Así, este trabajo se puede ver como una aproximación inicial para llevar a cabo estudios de simulación rigurosa a diversos casos de estudio de digestores anaerobios.

Algunos estudios que se pueden realizar a partir de las ideas presentadas en este trabajo son las siguientes:

1. Realizar la simulación rigurosa de procesos de DA de interés a la industria nacional. Por ejemplo, vinazas del tequila e industrias lácteas.
2. Extender la simulación rigurosa de procesos por Aspen Plus para incorporar otras unidades de tratamiento adicionales, debido a que para algunas aplicaciones, la degradación de carga orgánica con la DA no es suficiente para cumplir la legislación ambiental.
3. Llevar a cabo estudios de simulación rigurosa de patrones de flujo de digestores anaerobios de mayor complejidad, incluyendo los que requieren agitación mecánica.
4. Estudiar factores relevantes a considerar en la simulación rigurosa de la DA que no están contemplados actualmente en modelos como el ADM1, por ejemplo, la incorporación de especies iónicas.

Referencias

1. Alt, R., Markov, S. Theoretical and computational studies of some bioreactor models. *Computers and Mathematics with Applications* 64, 350–360, 2012.
2. Andrews, J.F. A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. *Biotechnol. Bioeng.* 10 (6): 707–723, 1968.
3. Angelidaki, I., Ellegaard, L., Ahring, B.K. A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnol. Bioeng.* 42: 159–166, 1993.
4. Angelidaki, I., Ellegaard, L., Ahring, B.K. A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnol. Bioeng.* 63: 363–372, 2000.
5. Batstone, D.J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S.V., Pavlostathis, S.G., Rozzi, A., Sanders, W.T.M., Siegrist, H., Vavilin, V.A., The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology* Vol. 45 No. 10 pp 65–73, 2002.
6. Bello-Mendoza R., Sharratt P.N. Modeling the effects of imperfect mixing on the performance of anaerobic reactors for sewage sludge treatment. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 71: 121-130, 1998.
7. O., Bernard, Z., Hadj-Sadok, D., Dochain, A., Genovesi, J., Philippe. Dynamical Model Development and Parameter Identification for an Anaerobic Wastewater Treatment Process. *Biotechnology and Bioengineering*, vol. 75, No.4, November 20, 2001.
8. Blesgen, A., Hass, V.C. Efficient biogas production through process simulation. *Energy Fuels* 24 (9): 4721–4727, 2010.
9. Boubaker, F., Ridha Ben C. Extension of the anaerobic digestion model No. 1 (ADM1) to include phenolic compounds biodegradation processes for the simulation of

anaerobic co-digestion of olive mill wastes at thermophilic temperature. *Journal of Hazardous Materials*: 162, 1563–1570, 2009.

10. Bruni, E., Jensen, A. P., Angelidaki, I. Steam treatment of digested biofibers for increasing biogas production. *Bioresource Technology*, 101(19): 7668-7671, 2010.

11. Celik, Ismail B. Introductory Turbulence Modeling. Lectures Notes. West Virginia University. Mechanical and Aerospace Engineering Department, P.O. Box 6106, 1999.

12. Cheng Jay. Biomass to Renewable Energy Processes. CRC Press LLC., Florida, USA, 2010.

13. Deublein, D., Steinhauser, A. Biogas from Waste and Renewable Resources. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008.

14. Flores-Mejia, H., Puebla, H., Méndez-Acosta, H.O., Jaramillo, N.E., Orozco, M. Optimización dinámica y control en tiempo finito de un reactor anaerobio lote secuencial (AnSBR) para el tratamiento de vinazas tequileras. En memorias de Congreso Nacional de Control Automático, 2011.

15. Fregoso-Sánchez F., Alcaraz-González V., González-Álvarez V. Adjustable asymptotic observers in batch and continuous bioreactors for anaerobic digestión. *The second international meeting on environmental biotechnology and engineering (2IMEBE)*, México D.F., 2006.

16. Galíndez, J., Ruiz, N. Fundamentos biocinéticos para el diseño de procesos fermentativos. Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, IPN. México, octubre de 1994.

17. Gavala, H., Angelidaki, I., Ahring, B. Kinetics and modeling of anaerobic digestion process. *Biomethanation I*, 57–93, 2003.

18. Guiot, S., Arcand, Y., Chavarie, C. Advantages of fluidization on granule size and activity development in upflow anaerobic sludge bed reactors. *Water Science and Technology* 26 (3-4): 897–906, 1992.

19. Jáuregui-Jáuregui, J. A., Méndez-Acosta, H. O., Snell-Castro, R., Alcaraz-González, V., González-Álvarez, V. Anaerobic treatment of Tequila vinasses in an up-flow fixed-bed reactor: start-up, operation and restart-up. *Memorias del 12th World Congress on Anaerobic Digestion-IWA*, Guadalajara-Jal., México, 2010.
20. Kumar-More, R., Kumar-Bulasara, V., Uppaluri, R., Banjara, V.R. Optimization of crude distillation system using aspen plus: Effect of binary feed selection on grass-root design. *Chemical engineering research and design* 88: 121–134, 2010.
21. Launder, B.E., Spalding, D.B. Lectures in mathematical models of turbulence. London, England: Academic Press, 1972.
22. Lizárraga-Palazuelos, J. Evaluación del desempeño de un digestor anaerobio en dos etapas para el tratamiento de vinazas tequileras bajo diferentes condiciones de operación. Tesis de Maestría, Universidad de Guadalajara, 2010.
23. Mata-Álvarez, J. Biomethanization of the Organic Fraction of Municipal Solid Wastes. International Water Association, TJ International (Ltd), Padstow, Cornwall, UK, pp. 1–18, 2003.
24. Mejía, G., Sánchez, M. Digestión Anaerobia. Universidad Autónoma de Yucatán. Folleto técnico No.1. Pag.19-22.
25. Méndez-Acosta H., Femat, R., Campos-Delgado, D. Improving the performance on the chemical oxygen demand regulation in anaerobic digestion. *Ind. Eng. Chem. Res.* 43: 95-104, 2004.
26. Méndez-Acosta, H., Snell-Castro, R., Alcaraz-González, V., Pelayo-Ortíz, C., González-Álvarez, V. Anaerobic treatment of Tequila vinasses in a CSTR-type digester, *Biodegradation* 21: 357-363, 2010.
27. Méndez-Acosta, H., Hernández-Martínez, E., Jáuregui-Jáuregui, J.A., Álvarez-Ramírez, J., Puebla, H. Monitoring Anaerobic Sequential Batch Reactors Via Fractal Analysis of pH Time Series. *Biotechnology and Bioengineering*, en prensa, 2013.

28. Mohammad Pour Bafrani. Citrus Waste Biorefinery: Process Development, Simulation and Economic Analysis. Department of Chemical and Biological Engineering. Chalmers University of Technology Göteborg, Sweden. Tesis Doctoral, 2010.
29. Monteith, H.D., Stephenson, J.P. Mixing efficiencies in full-scale anaerobic digesters by tracer methods. Journal WPCF, Volume 53, Number 1, 1981.
30. Muñoz-Valero, J., Ortiz-Cañavate, J., Vázquez-Minguela, J. Técnica y aplicaciones agrícolas de la biometanización. Ministerio de Agricultura Pesca y Alimentación, 1987.
31. Ojeda, K., Avila, O., Suárez, J., Kafarov, V. Evaluation of technological alternatives for process integration of sugarcane bagasse for sustainable biofuels production—Part 1. Chemical engineering research and design 89: 270–279, 2011.
32. Rajendran, K., et al. A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus. Bioresour. Technol. (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2014.01.051>
33. Rajeshwari, K., Balakrishnan, M., Kansal, A., Lata, K., Kishore, V. State-of-the-art of anaerobic digestion technology for industrial wastewater treatment. Renewable and Sustainable Energy Reviews 4 (2): 135–156, 2000.
34. Ramirez, I., Volcke, E., Rajinikanth, R., Steyer, J.P. Modeling microbial diversity in anaerobic digestion through an extended ADM1 model. Water research: 43, 2787–2800, 2009.
35. Ramzan N., Ashraf, A., Naveed S., Malik, A. Simulation of hybrid biomass gasification using Aspen plus: A comparative performance analysis for food, municipal solid and poultry waste. Biomass and bioenergy: 35, 3962–3969, 2011.
36. Renon, H. and Prausnitz, J.M. Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for Liquid Mixtures. AIChE Journal. Vol. 14, No. 1, 1968.
37. Ríos-Gutiérrez, M., Pelayo-Ortiz, C., González-Álvarez, V., Corona-González, R., Gutiérrez-López, E. Tratamiento de vinazas tequileras con bacterias anaerobias, 2003.

38. Rudniak, L., Piotr, M., Milewska, A. CFD modelling of stirred tank chemical reactors: homogeneous and heterogeneous reaction systems. *Chemical Engineering Science* 59: 5233–5239, 2004.
39. Sahu, J.N., Rama-Krishna, V.S., Hussain, S., Patwardhan, A.V., Meikap, V.C. Optimization of ammonia production from urea in continuous process using ASPEN Plus and computational fluid dynamics study of the reactor used for hydrolysis process. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* 16: 577–586, 2010.
40. Satyawali, Y., Balakrishnan, M. Wastewater treatment in molasses based alcohol distilleries for COD and color removal: a review. *Journal of Environmental Management* 86 (3): 481–497, 2008.
41. Serrano, R.P. Biogas process simulation using Aspen Plus. In: *Chemical Engineering*, Syddansk Universitet, Denmark, pp. 86, 2011.
42. Siegrist, H., Batstone, D. Free ammonia and pH inhibition of acetotrophic methanogenesis at meso and thermophilic conditions. In: *9th World Congress Anaerobic Digestion 2001*. Technologisch Instituut VZW, pp. 395–400, 2001.
43. Vavilin, V. A., Vasiliev, V. B., and Rytov, S. V. Modelling of gas pressure effects on anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 52 (1): 25–32, 1995.
44. Vesvikar M.S., Al-Dahhan, M.H. Flow pattern visualization in a mimic anaerobic digester using CFD. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 89, No. 6, March 20, 2005.
45. Wooley, R.J., Putsche, V. Development of an Aspen plus physical property database for biofuels components. National renewable energy laboratory golden, CO, USA, 1996.
46. Wooley, R., Ruth, M., Glassner D., Sheehan, J. Process Design and Costing of Bioethanol Technology: A Tool for Determining the Status and Direction of Research and Development. *Biotechnol. Prog.* 15: 794–803, 1999.

47. Wu, B., Chen, S. CFD Simulation of Non-Newtonian Fluid Flow in Anaerobic Digesters. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 99, No. 3, February 15, 2008.
48. Zaher, U. Modelling and monitoring the anaerobic digestion process in view of optimisation and smooth operation of WWTP's, PhD thesis, Ghent University, Ghent, Belgium, 2005.
49. Zárate, M. Estimación de parámetros y validación del modelo AM2 para un proceso de digestión anaerobia a escala piloto. Tesis de maestría. Universidad de Guadalajara.