

**Universidad de Sevilla**  
**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA**  
**INFORMÁTICA**



**DOCTORADO EN INGENIERÍA**  
**INFORMÁTICA**

---

**TESIS DOCTORAL**

**Modelo Adaptable Usando Datos en Tiempo Real en  
un Reactor de Digestión Anaerobia para Supervisión  
y Control.**

---

**Luis Gabriel Cortés Ocaña**

**Dirigida por:**

**Dr. D. Julio Barbancho Concejero**  
**Dr. D. Diego Francisco Larios Marín**

**Sevilla, noviembre de 2022**

---

---

## Agradecimientos

Quiero agradecer a mis padres, por haberme impulsado a tratar siempre de tener un concepto visionario de mi futuro profesional. Les agradezco el haberme situado en entornos desconocidos, hostiles y a su vez controladores, favorables académicamente, que me obligaron a averiguar cuáles deberían ser las herramientas, y desarrollarlas, para ser un buen profesional. Quiero agradecer a mi esposa, madre de mis dos bellos hijos, por siempre estar atenta a mi entorno y tratar siempre de ayudarme a encontrar el complemento que siempre he necesitado para salir adelante. No es suficiente la transpiración, se necesita visión, planear objetivos ambiciosos a su vez alcanzables para reducir la frustración y no solo eso, el plan debe ser ejecutado de manera inteligente. Eso ha sido mi esposa, mi faro, mi luz en medio de las adversidades que he encontrado en el camino.

Agradezco muy especialmente a la profesora Aida Liliana Barbosa, profesora de la Universidad de Cartagena, por haber comprendido mis intenciones de querer seguir capacitándome y ayudarme con toda su experiencia y recursos académicos a lograr ser aceptado en la beca de estudios doctorado internacional. Gracias a ella he tenido las herramientas para llevar a cabo la investigación durante todos estos años. Sin los recursos que el gobierno de Bolívar destinó para la creación de este programa académico de becas, todo este sueño no hubiera sido posible haberlo llevado en estas condiciones. Un agradecimiento muy profundo para la región colombiana a la que pertenezco.

Agradezco a mi tutor y director de tesis Julio Barbancho y Diego Francisco Larios por haberme recibido en su grupo de investigación a mi llegada a la Universidad de Sevilla. Su acompañamiento en todas las etapas durante mi estancia de estudios en España fueron fundamentales. La continua retroalimentación permitió darle forma y dirección a cada uno de los pasos que se daban para conseguir los objetivos trazados en el plan de investigación. Agradezco a María Ángeles de la Rubia, profesora de la Universidad Autónoma de Madrid, por haberse interesado y trabajado conmigo durante todos estos años desde que la contacté. La pasantía realizada en su laboratorio, conocer en detalle mi tema de investigación desde su área fue un complemento muy valioso para este trabajo. Jose Daniel Marín Batista, en su momento un estudiante de doctorado de la profesora, fue fundamental durante esta etapa de la investigación y para el trabajo en remoto que se siguió llevando a cabo. Agradezco al profesor Ángel Fernández Mohedano por su apoyo durante la pasantía y etapa de publicación de resultados.

---

# Índice

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
1.1	Motivación . . . . .	1
1.2	Propuesta de tesis . . . . .	2
1.2.1	Problema de investigación . . . . .	3
1.2.2	Hipótesis de investigación . . . . .	3
1.2.3	Objetivos . . . . .	3
1.2.4	Resultados esperados . . . . .	4
1.3	Contribución de la tesis . . . . .	4
1.4	Estructura de la tesis . . . . .	5
1.4.1	Contenido . . . . .	8
1.5	Metodología . . . . .	9
<b>2</b>	<b>Digestión anaerobia</b>	<b>11</b>
2.1	Introducción . . . . .	11
2.2	Tecnologías para el procesado de residuos orgánicos . . . . .	14
2.3	Aspectos generales de la digestión anaerobia . . . . .	18
2.4	Incremento en la producción de metano . . . . .	24
2.4.1	Potencial de generación de metano en la lignocelulosa . . . . .	24
2.5	Conceptos básicos de digestión anaerobia . . . . .	26
2.5.1	Tratamiento previo del sustrato . . . . .	26
2.5.2	Temperatura dentro del reactor . . . . .	27
2.5.3	Tiempo de retención orgánico . . . . .	27
2.6	Etapas de la digestión anaerobia . . . . .	28
2.7	Resumen . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Modelos reducidos para propósitos de control</b>	<b>31</b>
3.1	Introducción . . . . .	31
3.2	Modelado matemático de digestión anaerobia en reactores . . . . .	33
3.2.1	Conceptos básicos . . . . .	34
3.2.2	Dinámicas adicionales dentro del proceso . . . . .	36
3.2.3	Reacciones en el proceso . . . . .	39
3.3	Modelo matemático en reactores anaerobios . . . . .	48
3.3.1	Modelado de las cinéticas de bacterias . . . . .	49
3.3.2	Dinámicas en un modelo general de biorreactores . . . . .	59
3.3.3	Modelo en espacio de estados . . . . .	60
3.3.4	Evaluación de modelos reducidos encontrados en la literatura . . . . .	60
3.3.5	Mejoras propuestas para el modelo AM2 . . . . .	61
3.3.6	Selección de modelo y consideraciones . . . . .	65
3.4	Resumen . . . . .	70
<b>4</b>	<b>Implementación de sistemas de control en un reactor de digestión anaerobia</b>	<b>71</b>
4.1	Introducción . . . . .	71
4.2	Técnicas experimentales para la toma de datos . . . . .	72
4.2.1	Funcionamiento del reactor y estructura de control . . . . .	72

4.2.2	Procedimiento para la experimentación . . . . .	73
4.2.3	Medición de datos experimentales . . . . .	78
4.3	Datos experimentales . . . . .	82
4.4	Métodos para la estimación de los parámetros del modelo . . . . .	87
4.4.1	Regresiones lineales . . . . .	88
4.5	Implementación . . . . .	97
4.5.1	Identificación de reactor anaerobio en ambiente real . . . . .	97
4.5.2	Resultados . . . . .	99
4.6	Resumen . . . . .	108
<b>5</b>	<b>Monitorización y control en biodigestores</b> . . . . .	<b>111</b>
5.1	Introducción . . . . .	112
5.2	Estimación de estados y de parámetros . . . . .	115
5.2.1	Modelo matemático para la estimación de estados . . . . .	116
5.2.2	Estimador asintótico . . . . .	117
5.2.3	Estimador de cinéticas de reacción (estimación de perturbaciones) . . . . .	121
5.3	Control de los digestores anaerobios industriales . . . . .	127
5.4	Resultados de simulación y discusión . . . . .	134
5.4.1	Condiciones de simulación . . . . .	134
5.4.2	Observador asintótico . . . . .	134
5.4.3	Estimador de cinéticas de reacción . . . . .	136
5.4.4	Desempeño de un Controlador PID tradicional . . . . .	140
5.4.5	Controlador MPC para digestión anaerobia . . . . .	146
5.5	Resumen . . . . .	153
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b> . . . . .	<b>155</b>
6.1	Resumen de las conclusiones . . . . .	155
6.2	Trabajo futuro . . . . .	157
6.3	Contribuciones . . . . .	158
6.3.1	Actividades científicas . . . . .	158
6.3.2	Documentación científica . . . . .	159



## Lista de Figuras

1	Evolución de las aportaciones de la tesis (por cada área) y papers que han permitido soportar esa toma de decisiones . . . . .	5
2	Estructura de la tesis . . . . .	9
3	Número de reactores de digestión anaerobia y aumento porcentual respecto al año anterior, 2009 y 2016. . . . .	12
4	Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos. . . . .	15
5	Publicaciones por año con la palabra digestión y co-digestión anaerobia en el título [1]. . . . .	19
6	Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos [1]. . . . .	19
7	Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos. . . . .	20
8	Número de publicaciones con palabras clave en el título Google Scholar. . . . .	21
9	Digestión anaerobia dentro de un reactor. . . . .	30
10	Reactor para sistemas de bioprocesos. . . . .	34
11	Valor de $\mu$ representado por los modelos Monod y Haldane [2]. . . . .	38
12	Sustrato que ingresa al reactor concentrado. . . . .	41
13	Sustrato que ingresa al reactor luego de diluirlo con agua . . . . .	42
14	Curva de crecimiento de bacterias [3]. . . . .	50
15	Tasa de crecimiento específico según Haldane. . . . .	58
16	Esquemático del reactor de digestión anaerobia. . . . .	72
17	Estructura de control para el reactor de digestión anaerobia. . . . .	74
18	Equipos e instrumentación en el Laboratorio de Bioprocesos. . . . .	74
19	Reactores de digestión anaerobia, antes y durante llenado con inóculo. . . . .	75
20	Unidad recirculación térmica para la chaqueta del reactor. . . . .	76
21	Programación de tasa de carga orgánica en el reactor. . . . .	77
22	Conexión de bomba con el influente del reactor. . . . .	78
23	Posición final del reactor y mediciones off-line en laboratorio. . . . .	79
24	Obtención de sólidos suspendidos totales. . . . .	80
25	Filtro de microfibra de vidrio. . . . .	80
26	Medición de sólidos volátiles suspendidos por diferencia. . . . .	81
27	Cromatógrafo para medición de VFA. . . . .	82
28	VARIABLES medidas en caracterización del influente. . . . .	85
29	VARIABLES medidas en el efluente . . . . .	86
30	Producción de metano $CH_4$ y estado del $pH$ . . . . .	86
31	Recta de regresión entre $1/S_1$ y $1/D$ . . . . .	91
32	Recta de regresión entre $1/S_2$ y $1/D$ . . . . .	92
33	Optimización paramétrica en todo el tiempo de experimentación. . . . .	94
34	Arquitectura del algoritmo de optimización paramétrica en el reactor de digestión anaerobia. . . . .	96
35	Cuatro grupos para el sistema homogéneo de reacción de digestión anaerobia. . . . .	98

36	Entradas medidas o estimadas en el reactor de digestión anaerobia. . . . .	100
37	Ajuste del modelo a los datos de concentración de sustratos. Demanda química de oxígeno (DQO); y ácidos grasos volátiles (VFA). . . . .	101
38	Ajuste del modelo a los datos de concentración de bacterias acidogénicas, $X_1$ ; y concentración de arqueas metanogénicas, $X_2$ . . . . .	102
39	Ajuste del modelo a los datos de producción de metano $CH_4$ . . . . .	102
40	Ajuste del modelo a los datos de alcalinidad total $Z$ y nivel de $pH$ . . . . .	103
41	Funcionamiento del algoritmo step-ahead. . . . .	103
42	Entradas para medidas o estimadas para el sistema de digestión anaerobia. . . . .	105
43	Ajuste del modelo a los datos de concentración de sustratos. Demanda química de oxígeno (DQO), $S_1$ ; y ácidos grasos volátiles (VFA), $S_2$ . . . . .	106
44	Ajuste del modelo a los datos de concentración de bacterias acidogénicas, $X_1$ ; y concentración de arqueas metanogénicas, $X_2$ . . . . .	107
45	Ajuste del modelo a los datos de alcalinidad total $Z$ y nivel de $pH$ . . . . .	108
46	Ajuste del modelo a los datos de producción de metano $CH_4$ y nivel de $pH$ . . . . .	109
47	Estructura, observador asintótico y estimador cinética de reacciones. . . . .	122
48	Diagrama de bloques observador de estados Luenberger genérico. . . . .	123
49	Diagrama de bloques estimador, cinéticas de reacción. . . . .	124
50	Esquema de control MPC. . . . .	130
51	Horizonte de control y predicción en MPC. . . . .	131
52	Función multistart dentro del algoritmo de optimización en un controlador MPC. . . . .	133
53	Datos caracterización influente para la simulación. . . . .	135
54	Observador asintótico para la concentración de $X_1$ y $X_2$ . . . . .	135
55	Convergencia de las variables $X_1$ y $X_2$ estimadas debido al uso de la estructura de estimación de cinéticas de reacción. . . . .	136
56	Observador asintótico de las cinéticas de reacción $r_1$ y $r_2$ . . . . .	137
57	Acercamiento a valores de estimación de $r_1$ y $r_2$ . . . . .	138
58	Estimador de cinéticas de reacción para las variables de estado. . . . .	139
59	Error del estimador de cinéticas de reacción en variables de estado. . . . .	139
60	Tres perfiles distintos para el seguimiento de referencia de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	140
61	Estructura de control PID en reactor anaerobio . . . . .	141
62	Resultados tasa de dilución en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	142

---

63	Resultado nivel de pH en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	143
64	Resultados ácidos grasos volátiles ( $S_2$ ) en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	144
65	Resultados valor de $\lambda$ en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	145
66	Resultados de la restricción operacional en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID. . . . .	146
67	Resultados del controlador MPC sin restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	147
68	Resultados del controlador MPC sin restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	148
69	Resultados del controlador MPC sin restricciones con multi-start en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	149
70	Resultados del controlador MPC sin restricciones con multi-start en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	149
71	Resultados del controlador MPC con restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	150
72	Resultados del controlador MPC con restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	151
73	Resultados del controlador MPC con restricciones con multi-start en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	152
74	Resultados del controlador MPC con restricciones con multi-start en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido. . . . .	153

## Lista de Tablas

1	Mercado digestión anaerobia en Europa: segmentación [4]. . .	13
2	Ventajas y desventajas de la digestión anaerobia y del compostaje. . . . .	21
3	Composición típica de biogás y gas generado por compost. . .	23
4	Fuentes de emisiones asociadas a las estrategias de mitigación de digestión anaerobia y compostaje. . . . .	23
5	Tipos de modelos cinéticos; estructurados y desestructurados.	51
6	Modelos cinéticos mas importantes encontrados en la literatura.	53
7	Parámetros del modelo que van a ser identificados. . . . .	65
8	Valor de OLR para cada uno de los días del experimento. . .	83
9	Principales características del lodo usado en el experimento.	83
10	Valores parámetros cinéticos. . . . .	92
11	Información experimental media para cada rango de SRT. . .	93
12	Valores calculados de los parámetros cinéticos . . . . .	94
13	Variables seleccionadas para ajustar el modelo matemático al experimento mediante los parámetros a estimar. . . . .	95
14	Concentración de bacterias metanogénicas (células/mL) e incremento microbiano . . . . .	105
15	Valores de los parámetros seleccionados. . . . .	107
16	Cuantificación, ajuste de modelo a datos experimentales. . .	108
17	Condiciones iniciales variables de estado. . . . .	134
18	Mejora en el rendimiento en la producción de metano $CH_4$ para cada uno de los esquemas de control MPC propuestos. .	152

---

# 1 Introducción

## 1.1 Motivación

En la actualidad, existe una gran preocupación a nivel mundial acerca del lugar en donde son almacenados los residuos de materia orgánica, debido a que su descomposición anaerobia genera líquidos lixiviados y gases efecto invernadero. En este sentido, la industria y la comunidad científica han centrado sus esfuerzos en los sistemas que reducen grandes volúmenes de estos residuos, como son los digestores anaerobios, sobre todo para mejorar su eficiencia. Los reactores de digestión anaerobia han demostrado tener varias ventajas para tratar los residuos orgánicos, debido a que tienen la capacidad de degradar sustratos densos como residuos de plantas, desechos de animales, aguas residuales, entre otros elementos. Además, se produce biogás como subproducto, un combustible compuesto por metano y dióxido de carbono que es aprovechado para producir energía en forma de calor o electricidad [5]. La implementación de estos digestores permite que las personas minimicen voluntariamente la cantidad de basura producida, y en consecuencia, la cantidad de residuos orgánicos que son transportados hacia los vertederos. Sin embargo, existe una barrera que impide instalar estos sistemas a gran escala, y es que no hay una oferta de sensores comerciales que tengan la capacidad, calidad y bajo coste o algoritmos capaces de hacer frente a la incertidumbre del proceso que permitan usar esta tecnología masivamente. Hoy por hoy, siguen abiertos algunos problemas para el diseño y operación de este tipo de reactores, a saber: no existen sensores comerciales que proporcionen información fiable de algunas variables críticas del proceso en tiempo real, no hay posibilidad de conocer todos los detalles de la fenomenología del proceso biológico y fisico-químico, y la complejidad del proceso (no linealidad) impide formular modelos matemáticos simples y precisos [5].

Muchas instituciones privadas y gubernamentales tienen cada vez mayor interés en aportar recursos económicos para mejorar estos sistemas, más aún cuando en el ámbito público, los gobiernos están obligados a cumplir con los objetivos de desarrollo sostenible. Cabe notar que, el uso de esta tecnología permite mejorar la calidad de las aguas residuales que son vertidas a los ríos

y océanos, se evita la liberación de gases efecto invernadero que se generaría en los depósitos tradicionales de almacenamiento como vertederos, y se usa el biogás producido para generar calor o energía eléctrica [5]. Por lo tanto, la implementación de los digestores constituye una alternativa para ayudar a cumplir con los objetivos trazados en los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), por los gobiernos para luchar en contra del cambio climático. En el ámbito privado, a las empresas les interesa cumplir con las regulaciones ambientales en temas como el tratamiento de las aguas residuales que son vertidas en las fuentes hídricas. Entonces, la implementación de estas tecnologías no solo les permitiría cumplir con la norma, sino también mejorar sus indicadores de competitividad debido a que gastarían menos dinero en mantener estos sistemas operativos. Sin embargo, a pesar de que se han logrado muchos avances en el desarrollo de esta tecnología, persisten algunos inconvenientes que limitan su uso [6].

Esta tesis tiene como objetivo mejorar la tecnología que monitoriza y controla los reactores de digestión anaerobia. La falta de conocimiento que existe dentro de la reacción, las no linealidades y la falta de sensores se resolverá con un modelo matemático que sea insensible a esta falta de información. Un estimador y un observador de estados será complementario, permitiendo conocer las cinéticas de reacción, que son los parámetros que se proponen varían en relación con el estado de la reacción. Finalmente, un sistema de supervisión y control basado en optimización permitirá calcular las mejores decisiones que mantengan el sistema operativo, con un aumento en el desempeño en la producción de biogás y minimización de la carga orgánica en el efluente lejos de zonas de inestabilidad e inhibición.

El trabajo de investigación que se llevó a cabo durante la estancia de investigación del estudiante en el programa de doctorado de la Universidad de Sevilla, hace parte de un programa financiado por el gobierno de Colombia, en el que, a través de recursos públicos, destinados para ciencia, tecnología e innovación, se estableció como objetivo de formar a un grupo de beneficiarios en programas de doctorado en el exterior. El objeto de la convocatoria es enviar a los estudiantes a formarse en instituciones de alta calidad académica para que los aprendizajes sean transferidos para la solución de problemas propios de la región de donde son financiados. Para el caso de Bolívar, el estudio de uso de material orgánico y sistemas de supervisión y control para la generación de biogás como fuente de energía, permitirá a futuro plantear proyectos de innovación que saquen provecho de los residuos orgánicos que son dispuestos en vertederos y no aprovechados.

## 1.2 Propuesta de tesis

Esta sección contiene la propuesta de tesis, resultado de la validación de la información y modificaciones realizadas sobre la propuesta inicial de investigación presentada al inicio del programa de doctorado. Los aportes realizados y la búsqueda del conocimiento se llevó a cabo en las estancias de investigación y asesorías realizadas en universidades externas. Un flujo

constante de información para el desarrollo del trabajo tuvo lugar dentro del grupo de investigación de Informática Industrial y Tecnología Electrónica de la Universidad de Sevilla.

### 1.2.1 Problema de investigación

En la actualidad, la gestión de residuos producidos por la actividad humana se enfrenta a un reto de logística. La cantidad de basura producida ha aumentado considerablemente conforme la población ha aumentado y la economía de los sectores económicos se ha desarrollado. Adicional a ello, las regulaciones ambientales instan a mejorar las alternativas existentes de tal manera que se aproveche la mayor cantidad del material desechado [7]. En particular, el material orgánico puede ser aprovechado con el fin de disminuir el volumen y los impactos negativos en los vertederos, tales como la emisión de gases de invernadero y la filtración de lixiviados en las aguas subterráneas. Al respecto, el proceso de digestión anaerobia se está consolidando como una alternativa de aprovechamiento del material orgánico para la producción de metano y reducción de carga orgánica en el efluente del reactor. Sin embargo, existen varios retos para el diseño y operación de estos sistemas a gran escala. Un avance significativo en la operación de estos sistemas implica su automatización, donde la toma de decisiones esté apoyada por un sistema de supervisión y control. Con ello se podrán mejorar los niveles de producción de biogás y la calidad de los lodos contaminantes que salen por el efluente del reactor, todo esto indiferente del tipo de biomasa que sea usada. Para este fin, se hace necesario entonces proponer una metodología que integre la información obtenida del proceso por medio de los sensores, instalados en el reactor, y sensores virtuales (estimadores de estado) capaces de medir el estado de la reacción por medio de términos dedicados llamados cinéticas de reacción [8].

### 1.2.2 Hipótesis de investigación

Es posible diseñar un sistema autónomo e inteligente de supervisión y control para reactores de digestión anaerobios, que maximice la cantidad de metano producido y que garantice su operación dentro de los límites permitidos, indistintamente de la biomasa que sea usada y bajo escenarios de información limitada de las cinéticas de reacción dentro del proceso.

### 1.2.3 Objetivos

**Objetivo general** Proponer una metodología que permita diseñar un sistema autónomo e inteligente de supervisión y control en reactores de digestión anaerobia, para maximizar la cantidad de metano producido usando la información limitada de las cinéticas de reacción dentro del proceso. Dicho sistema debe garantizar su operación dentro de los límites permitidos indistintamente del tipo de biomasa que se utilice.

**Objetivos específicos** A continuación, se listan en orden los objetivos específicos que posibilitan el cumplimiento del objetivo general de esta tesis.

1. Seleccionar un modelo matemático, para propósitos de supervisión y control, que permita la inclusión de diferentes tipos de biomasa.
2. Obtener datos experimentales del proceso y ajustar los parámetros del modelo matemático.
3. Proponer una metodología que permita usar el modelo matemático y los datos disponibles del proceso para estimar, a través de sensores virtuales, el valor de las cinéticas de reacción de la mezcla homogénea.
4. Diseñar un sistema de control automático óptimo y evaluar su desempeño en comparación con otras metodologías.

#### 1.2.4 Resultados esperados

Al concluir esta tesis se esperan obtener los siguientes resultados:

- Un modelo matemático de complejidad reducida que pueda ser usado para propósitos de supervisión y control en el proceso de digestión anaerobia. Se espera que el modelo permita la inclusión de términos que caractericen cualquier tipo de biomasa.
- Un conjunto de parámetros del modelo matemático que se ajusten a un caso de estudio real.
- El diseño de sensores virtuales basados en modelo para la estimación de los estados no medidos de la reacción.
- Un controlador óptimo basado en modelo MPC que maximice la producción de biogás.

### 1.3 Contribución de la tesis

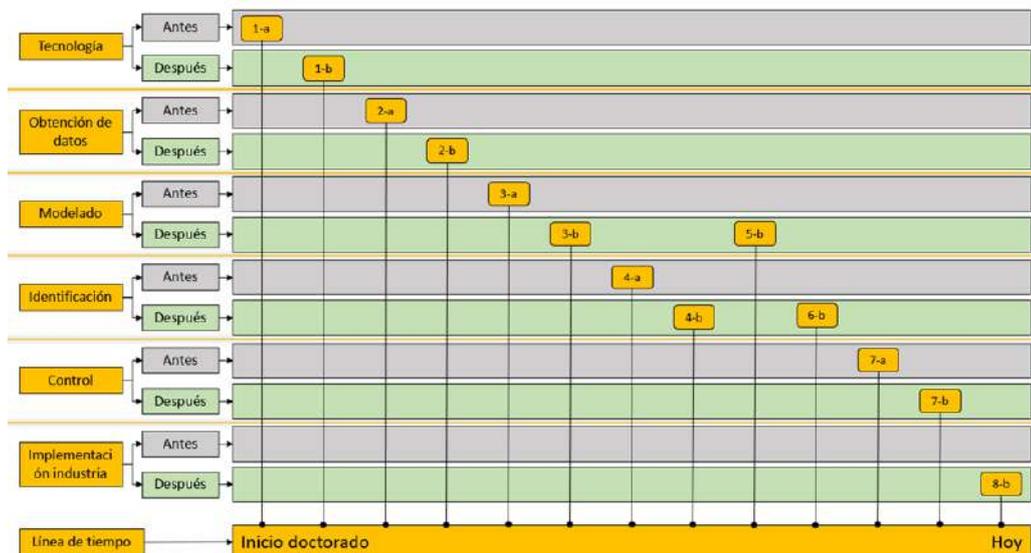
Este trabajo de tesis tiene como objetivo desarrollar una metodología que permita diseñar un sistema de supervisión y control en un reactor de digestión anaerobia. Por lo tanto, para lograrlo, se hace una lista de las contribuciones del trabajo que permiten lograr este propósito.

- Diseño y validación de un modelo matemático que se ha adaptado, mediante la adición de unas variables, que permitan usar el modelo para un amplio espectro de biomasa.
- Desarrollo de un modelo que integre los datos medidos por sensores en el reactor y la información de las cinéticas de reacción reconstruida por sensores virtuales programados.
- Diseño de un controlador automático óptimo que evite la operación del sistema en zonas de inhibición e inestabilidad, y que maximice el biogás producido.

## 1.4 Estructura de la tesis

Esta tesis está compuesta por seis áreas del conocimiento, las cuales están organizadas en la parte izquierda de la Figura 1. Cada área cuenta con líneas, en gris y en verde, que representan la temporalidad desde el inicio hasta el fin del doctorado. En la franja gris se muestran los artículos científicos que se usaron como punto de partida para cada una de las áreas de investigación, en tanto que, en la franja verde se muestran los artículos que se usaron para argumentar las mejoras propuestas.

En el inicio del trabajo de doctorado, se planteó una idea de investigación enfocada en resolver un problema específico para poblaciones rurales en la región del Caribe colombiano, en la que se pretendía diseñar un sistema de nueva tecnología que hiciera posible producir energía renovable en regiones de difícil acceso a servicios públicos domiciliarios. Usando estiércol de ganado y/o desechos de la agroindustria, se pretendía usar biorreactores que generaran biogás para ser usado como fuente de calor mediante su combustión o para la producción de energía eléctrica. Sin embargo, luego de hacer una revisión de bibliografía y las tendencias, se modificó el objetivo al diseño de una tecnología extrapolable para sistemas de producción de biogás a nivel industrial, en la que se pretendería por primera vez desarrollar un algoritmo, junto con un sistema instrumentado, que sirviera como una herramienta de soporte a la toma de decisión en su operación semi-autónoma para la maximización de producción de metano. Lograr este objetivo permitiría además obtener la experiencia para adaptar esta tecnología a la instalación de sistemas de menor complejidad a zonas de poblaciones rurales en Colombia.



**Figura 1:** Evolución de las aportaciones de la tesis (por cada área) y papers que han permitido soportar esa toma de decisiones

A continuación, se explica cómo evolucionó cada una de las áreas de conocimiento

de la Figura 2; desde su propuesta inicial hasta cómo se replanteó para lograr la mejora o novedad en la tecnología. Para cada una de las secciones se explica el *Antes* y el *Después*, así como el argumento de cada una de ellas.

## Áreas de conocimiento de la tesis

### Tecnología

- **(1.a.) → Antes/Digestión anaerobia seca:** La propuesta inicial de tesis se centró en desarrollar la investigación alrededor del proceso de digestión anaerobia seca. La revisión de la literatura demostró que esta área de la investigación tenía un futuro prometedor en el que se pretendería reducir la cantidad de agua gastada durante el proceso [9].
- **(1.b.) → Después/Digestión anaerobia húmeda:** Luego de profundizar en la búsqueda de la literatura, tanto en esta línea de investigación como en otras que eran tendencia, se tomó la decisión de trabajar en la línea de digestión anaerobia húmeda, enfocada en la mejora de los sistemas de supervisión y control para maximizar la producción de biogás [10].

### Obtención de datos

- **(2.a.) → Antes/Levantamiento de datos en reactor de digestión anaerobia 3 L:** En un principio el plan propuesto en la investigación consistía en generar los datos en un reactor a escala de laboratorio de 3 Litros con una biomasa proveniente de la agricultura en el Departamento de Cristalografía, Mineralogía y Química Agrícola de la Universidad de Sevilla.
- **(2.b.) → Después/Lodos residuales sistema de tratamiento de aguas 150 Litros:** Gracias a la realización de una pasantía doctoral en la Universidad Autónoma de Madrid, fue posible obtener los datos de una planta piloto que trabajó durante casi un año de operación. Esta investigación se centró en averiguaciones para otros aspectos, sin embargo, cumplió con los objetivos que se requerían para el tema de modelado matemático, ya que el sistema trabajó en diferentes situaciones operacionales, lo que permitió realizar una caracterización objetiva del sistema. La planta piloto era un reactor CSTR de 150 L con lodos primarios y secundarios en una planta de tratamiento de aguas residuales [11].

### Modelado

- **(3.a.) → Antes/Identificación de modelo con datos del reactor en laboratorio:** De la experimentación que se iba a llevar a cabo en la sección 2.a. se iba a construir un modelo basado en datos para propósitos de supervisión y control [12].

- **(3.b.) → Después/Selección de modelo reducido:** Sin embargo, en la investigación llevada a cabo por Bernard et al. [5], un modelo matemático de carga computacional reducida pero desarrollado para ser tolerante a la falta de información proveniente del fenómeno bioquímico fue planteado. La falta de información biológica fue compensada con dos términos dedicados llamados reaction rates.
- **(5.b.) → Después/Modelos de sistemas de reacción homogénea basados en concentraciones con términos dedicados:** Términos dedicados se adicionaron al modelo reducido, lo que permitiría considerar un tipo de biomasa.

### Identificación

- **(4.a.) → Antes/Identificación paramétrica basada en regresiones lineales:** Para el modelo reducido seleccionado AM2, Bernard et al. [5] propuso llevar a cabo una identificación paramétrica (comprobando la identifiabilidad: lo que garantiza una solución única para los parámetros encontrados), donde se establecieron rectas de regresión solo cuando el sistema era capaz de estabilizarse alrededor del estado estacionario.
- **(4.b.) → Después/Identificación paramétrica basada en la solución de un problema de optimización:** Se planteó trabajar en un problema de optimización paramétrica, en donde se ingresó explícitamente las restricciones físicas y operacionales del proceso. Los grados de libertad que me permitirían cumplir con el objetivo de ajustar el modelo matemático a los datos experimentales serían los parámetros [13].
- **(6.b.) → Después/Estimadores de estado:** Se planteó la identificación de los estados no medidos durante la operación del reactor de digestión anaerobia mediante un observador asintótico y se reconstruyó los términos cinéticas de reacción mediante el uso de un estimador adaptable [14].

### Control

- **(7.a.) → Antes/Control Predictivo basado en Modelo (MPC) para sistemas de digestión anaerobia:** Kil et al. [15] propuso el desarrollo de un controlador MPC usando el modelo AM2 de Bernard et al. [5] Se planteó en principio diseñar un sistema de control MPC que permitiría, a través de su correspondiente horizonte de predicción, tomar decisiones tiempo presente y anticiparse a perturbaciones.
- **(7.b.) → Después/Mejora de la estructura del sistema de supervisión y control:** Un sistema autónomo de supervisión y control que contenga un modelo mixto para la captura de información; a través de sensores y tecnología de estimación de estados de reacción del proceso.

## Implementación industrial

- **Antes:** No hay registro.
- **(8.b.) → Después/Implementación de sistema de control en la industria:** La metodología desarrollada permitirá plantear un sistema de control MPC a nivel industrial. La propuesta considera una extensión del modelo.

### 1.4.1 Contenido

Para desarrollar los objetivos de esta tesis, se propusieron seis capítulos que buscan encontrar una solución a los problemas encontrados a la hora de plantear la solución a un problema de investigación. Los detalles de este contenido se muestran a continuación.

**Capítulo 1** Presenta la introducción del trabajo de tesis, la motivación que se encontró para trabajar en su desarrollo y los aportes que se hicieron para lograr los objetivos propuestos.

**Capítulo 2** Presenta las generalidades del proceso de digestión anaerobia y los principales conceptos que permiten entender cómo funciona el proceso dentro de un reactor. Se documentan los fenómenos físico-químicos y biológicos, que le permiten a los grupos de bacterias, digerir la materia prima orgánica hasta la producción de biogás. Esto se explicará en detalle a través de la ruta metabólica que gobierna el proceso.

**Capítulo 3** Describe el estado del arte del modelado de sistemas de digestión anaerobia, haciendo énfasis en los modelos de complejidad reducida para propósitos de supervisión y control. Aquí se explica por qué los balances de masa son los más adecuados para cumplir con este propósito y de qué manera la falta de conocimiento en la fenomenología del proceso puede ser asumida por términos dedicados llamados cinéticas de reacción.

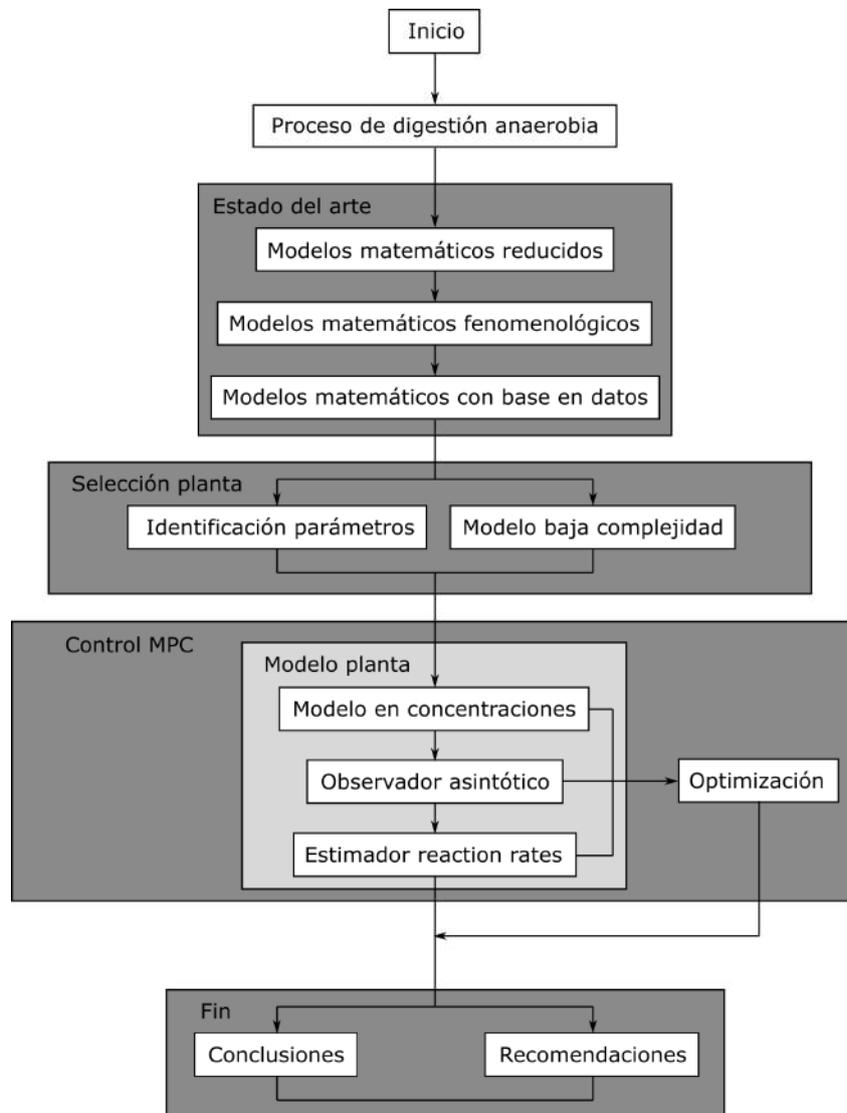
**Capítulo 4** Proporciona la metodología de identificación de parámetros que se usó para ajustar los datos experimentales al modelo matemático seleccionado para representar el proceso de digestión anaerobia en un reactor. Se explica además de qué manera las mejoras propuestas al modelo en el Capítulo 3 surtieron efecto y dan una mejor respuesta a la descripción del proceso.

**Capítulo 5** Se presenta cómo fue diseñado el esquema estimador de cinéticas de reacción y controlador autónomo basado en optimización que permite calcular las acciones de control para mantener el sistema dentro de los límites de operación, lejos de zonas de inhibición e inestabilidad, en el que se maximice la producción de biogás.

**Capítulo 6** Finalmente se entregan las conclusiones que se lograron con el trabajo de investigación y se explica de qué manera ha sido posible mejorar el diseño de estos sistemas para el proceso de digestión anaerobia. También se sugiere el trabajo futuro que ha resultado de este trabajo de investigación y las publicaciones que se han llevado a cabo a lo largo de este proceso.

## 1.5 Metodología

En esta sección se expone el proceso metodológico que soporta el trabajo de tesis. La Figura 2 muestra el esquema de los procesos que fueron llevados a cabo durante el desarrollo del trabajo de tesis. El proceso dio inicio con la propuesta de tesis que fue entregada al inicio del programa de doctorado. La siguiente etapa empieza por la comprensión del proceso de digestión anaerobia, es decir, la biología y las reacciones físico-químicas que se llevan a cabo en el proceso de degradación de residuos orgánicos debido a la acción de las bacterias.



**Figura 2:** Estructura de la tesis

Seguidamente, se realiza un levantamiento del estado del arte respecto a los modelos que han intentado dar explicación al proceso, desde modelos que consideran todas las dinámicas del proceso metabólico (usados como referencia), pasando por modelos basados en datos (que tienen el objetivo de lograr un ajuste al comportamiento encontrado en los datos reales para tratar de explicar las no linealidades), hasta los modelos reducidos (pensados para propósitos de supervisión y control, han demostrado muy buenos ajustes a pesar de su baja complejidad).

Finalmente, se realiza la selección del modelo matemático AM2, que va a ser usado como referencia para hacer las pruebas y el desarrollo del sistema de supervisión y control, junto con los estimadores y observadores de estado. Los datos usados en la identificación paramétrica fueron obtenidos de una prueba real de un biodigestor que operó durante un año en un amplio espectro de situaciones. Aquí se prueba el desempeño del sistema y se vigila el comportamiento tanto de los grupos de bacterias como el de los sustratos, ante situaciones de inhibición y bajas y elevadas tasas de producción. En la última etapa, se propone un sistema de control MPC que usa un modelo mixto, que integra tanto los estados medidos (por sensores) como los no medidos (estimados). El cálculo de las acciones de control sobre el sistema se lleva a cabo mediante la solución de un problema de optimización que consideró tanto las restricciones físicas como operacionales. Esto permite mejorar la producción de metano porque se evita que el sistema trabaje en puntos no factibles de operación. Aquí, se comprueba la fiabilidad de la metodología propuesta debido a que es posible medir el estado de las reacciones del sistema mediante el cálculo de las cinéticas de reacción. Finalmente, en las conclusiones se discuten todos los resultados y el trabajo futuro que complementa este proyecto de investigación.

---

## 2 Digestión anaerobia

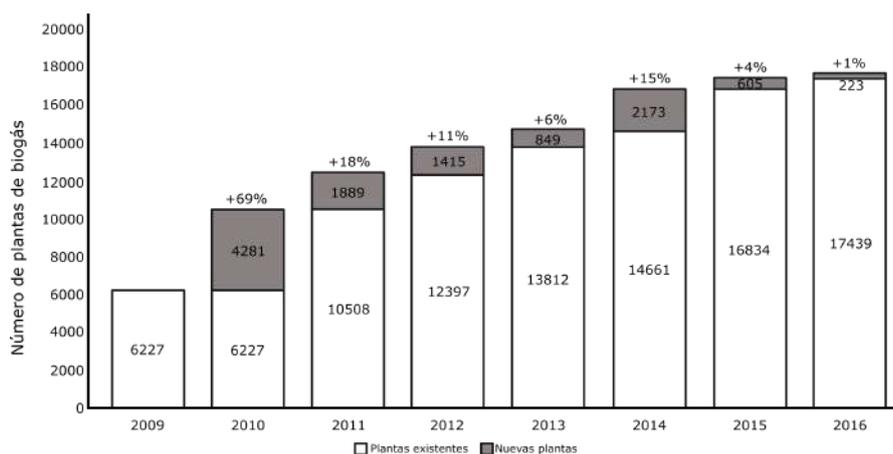
El proceso de digestión anaerobia (AD) es una secuencia de procesos que involucran poblaciones de bacterias en un proceso de digestión de materia orgánica en ausencia de oxígeno. Representa una gran oportunidad para procesar los residuos de diferentes industrias debido a que se mejora la calidad del material residual. Este proceso mejora entre un 58% y un 90% la remoción de la demanda química de oxígeno (COD). A su vez, esta tasa produce entre  $0.24 \text{ m}^3\text{CH}_4/\text{kg}$  y  $0.4 \text{ m}^3\text{CH}_4/\text{kg}$  por cada unidad de COD removido de la atmósfera Bastin. Esta tecnología puede ser usada para tratar grandes cantidades de desperdicio de estiércol de ganado y sus problemas asociados en la industria de crianza de animales en fincas. Si todo se planea correctamente, el balance de energía resulta en generación de ahorro por el autoconsumo de energía. A pesar de que no es una tecnología nueva, no es común encontrarla instalada en estos sitios, por lo que el énfasis que se hace en su correcta planeación para su aprovechamiento es fundamental.

Como se observará más adelante, se conocerán los componentes del sistema de generación de energía en reactores anaerobios que hacen posible el proceso de digestión anaerobia. Esto permitirá entender de qué manera se plantean estrategias exitosas que mejoran el rendimiento de la cantidad de metano producido cuando se adiciona una segunda materia prima (co-digestión). También se comprenderá cómo es posible gestionar la mejora en los índices de desempeño junto con la permanencia del sistema en rangos factibles de operación que eviten, por ejemplo, reducciones en el rendimiento por inhibiciones.

### 2.1 Introducción

Para el año 2050, se estima que la población humana se incrementará hasta los 9.5 billones de personas y que la demanda de energía se duplicará en comparación con el nivel actual. Adicional a ello, la cantidad de agua que será consumida crecerá en un 60%. Por lo tanto, si queremos satisfacer esta demanda de recursos en el futuro, necesitamos cambiar la manera de como producimos los bienes y los servicios, es decir, necesitamos ser más productivos. Este reto es aún mayor debido a que el medio se torna cada

vez menos favorable, en tanto la temperatura de la tierra continúe incrementándose [16]. Una de las consecuencias de este hecho es que la cantidad de desperdicios que produciríamos será proporcional a esta demanda, por lo que surge la necesidad de desarrollar o mejorar las tecnologías que permitan tratar estos compuestos antes de ser vertidos al medio ambiente. Una de las alternativas que se han desarrollado durante los últimos años es la tecnología de digestión anaerobia, que permite reducir en algunas situaciones en hasta un 95% el contenido orgánico en los afluentes residuales. En la actualidad, este proceso es muy usado porque también permite reducir los gases de efecto invernadero, ya que estos son almacenados y usados para ser aprovechados como fuente de energía para la generación de calor o de electricidad [8]. Dado que para los próximos años se espera un incremento de la basura orgánica generada, si no se plantean las soluciones correctas a este problema, grandes cantidades de basura orgánica podrían deteriorar los recursos naturales, resultando en un deterioro de la seguridad alimentaria y la supervivencia del ser humano a largo plazo. Por esta razón, deben ser exploradas nuevas tecnologías, o mejorar las existentes, de tal manera que permitan reusar y tratar la basura orgánica.



**Figura 3:** Número de reactores de digestión anaerobia y aumento porcentual respecto al año anterior, 2009 y 2016.

Según el informe anual más reciente de la Asociación Europea de Biogás del año 2021, a finales del año 2020 en Europa existían alrededor de 19 832 reactores de digestión anaerobia. De este valor total, aproximadamente el 70% de los residuos provienen de sustratos directamente de la agricultura. La mayoría de estos reactores se encuentran operando en Alemania, seguido de lejos por Italia. Una de las razones que ha hecho que se reduzca el crecimiento de la capacidad instalada por año en la Unión Europea, es que el país que lidera este indicador, Alemania, ha impulsado una nueva ley de energías renovables que reduce los incentivos a la industria del biogás (esto se puede ilustrar claramente en la Figura 3 [17].

Finalmente, en la Tabla 1 se presenta un resumen del estado actual del mercado de digestión anaerobia en Europa. Es importante resaltar que el valor de mercado que tiene esta tecnología en Europa, calculado para el

Categoría	Tipo
Materia prima	Residuos orgánicos
	Lodos de depuradora
	Cultivos combustible
Geografía	Europa
	Alemania
	Francia
	Resto de Europa
Proceso	DA seca
	DA húmeda
Actores clave	Agrinz technologies
	EnviTec Biogás
	Viessman Group
	Weltec Biopower

**Tabla 1:** Mercado digestión anaerobia en Europa: segmentación [4].

año 2020, es de 47.05 billones de dólares. Se pronostica que su valor crezca hasta los 84.20 billones de dólares para el año 2028. Una de las razones que estima este crecimiento son las políticas restrictivas que tendrán que implementarse en la Zona Euro para reducir al máximo las emisiones de gases efecto invernadero. Para lograr este propósito se debe hacer énfasis en el desarrollo de alternativas verdes como lo son los reactores de digestión anaerobia a partir de residuos orgánicos.

De acuerdo con lo anterior, la transformación de los residuos, provenientes de las actividades productivas de los sectores económicos en poblaciones urbanas y rurales, se han convertido en los últimos años en un objetivo prioritario en las políticas gubernamentales. Por lo tanto, el uso de las tecnologías que transformen estos elementos en materiales aprovechables y menos nocivos para la naturaleza son ahora muy apreciadas tanto para el sector público como privado. En este sentido, la basura orgánica se considera una fuente de producción de energía, de restablecimiento de los nutrientes y de restauración del suelo. Sin embargo, si no existe una correcta disposición de este material, este es considerado una fuente de gases efecto invernadero que deteriora el medio ambiente, dado que por lo general es alojado en rellenos sanitarios donde se produce descomposición anaeróbica [18]. En España, por ejemplo, la descomposición de basura orgánica en vertederos a cielo abierto produce alrededor del 2% del total de gases efecto invernadero. En países como Colombia, este mismo indicador representa el 3% del total de gases efecto invernadero. De acuerdo con las perspectivas económicas mundiales, se espera que estos niveles se incrementen proporcionalmente al crecimiento económico que se pronostica para los próximos años [19]. Por esta razón, hace algunos años se han diseñado políticas para tratar este tipo de residuos con modelos de negocio factibles que han hecho que a las empresas privadas les sea rentable establecer sus negocios desarrollando esta tecnología.

En España, el marco legislativo europeo ha tenido una gran repercusión en el aumento del número de reactores de digestión anaerobia construidos durante los últimos años. En la Directiva 1999/31/CE del Consejo Europeo relativa al vertido de residuos (recientemente modificada por la Directiva europea 2018/850), se restringe la disposición de materia biodegradable en vertederos, que suele ser la opción más empleada para la gestión de residuos en España. De este modo, se busca utilizar los residuos biodegradables como recursos para la generación de biogás mediante digestión anaerobia, incentivando el uso de esta tecnología [20]. Sin embargo, a nivel estatal, el marco político no es el más adecuado. A pesar de que el gobierno de España formalmente comenzó a desarrollar un plan estratégico con el Real Decreto 661/2007, en el que se regulaba la actividad de la producción eléctrica, la implantación del Real Decreto 1/2012 suspendía los incentivos económicos a fuentes de energía renovables, lo cual significó un gran revés para el sector. Adicionalmente, la alta fiscalización de estas tecnologías, sumado al poco apoyo económico tanto del gobierno como el de los bancos, ha llevado a que en España únicamente operen aproximadamente 50 reactores de digestión anaerobia que procesan residuos provenientes de la agricultura. Bajo este contexto, no es una novedad que la adopción de esta tecnología se lleve a cabo en su mayoría en las estaciones depuradoras públicas de aguas residuales, en donde la centralización de residuos de una ciudad permite una fácil instalación de esta tecnología que debe garantizar que los residuos vertidos al agua no sean extremadamente tóxicos [20]. En la comunidad de Madrid, por ejemplo, el número de sistemas de tratamiento anaerobio se restringe exclusivamente a las empleadas por el Canal de Isabel II en los sistemas de tratamiento de aguas residuales, que estabilizan los fangos provenientes del tratamiento secundario. De las 157 estaciones que funcionan actualmente, 21 presentan digestores anaerobios: 8 en la ciudad de Madrid y las 13 restantes distribuidas a lo largo de toda la comunidad [21].

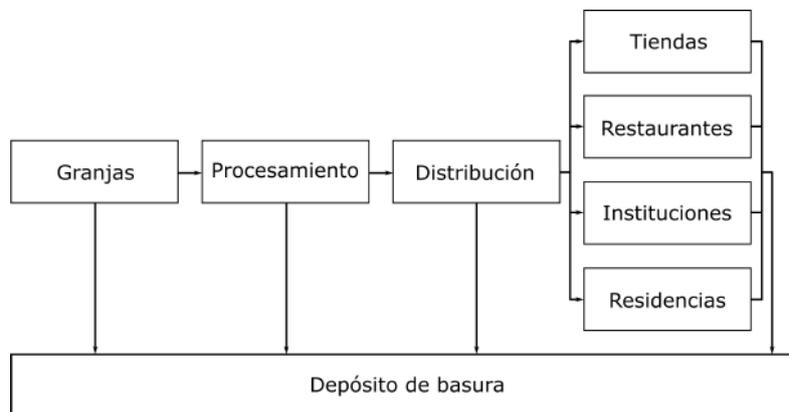
En la siguiente sección se van a describir las alternativas que son usadas en la actualidad para procesar los residuos alimentarios que son generados a lo largo de la cadena de valor agroalimentario. Como se va a observar, a pesar de que la digestión anaerobia sea la mejor alternativa, esta no ha sido implementada masivamente a nivel industrial debido a la influencia de factores políticos (ayudas a la financiación de este tipo de proyectos) y a la falta de desarrollos tecnológicos que permitan implantar una tecnología que le permita al sistema ser más autónomo y eficiente.

## 2.2 Tecnologías para el procesado de residuos orgánicos

Con el fin de mantener la seguridad alimentaria y la salud de la población humana, se requiere que en la cadena de valor agroalimentaria se produzca comida con técnicas sostenibles y renovables, y a su vez, se generen productos con buena calidad de nutrientes. Sin embargo, la estructura que hace posible este propósito presenta algunos inconvenientes que no permiten que funcione adecuadamente. En algunas partes de la cadena hay sobre costos y un uso excesivo de los recursos naturales, que generan una huella ambiental

negativa y, por lo tanto, un impacto no favorable [22]. Las cadenas de valor agroalimentarias frecuentemente se ven enfrentadas a problemas de roturas en los eslabones logísticos que se pueden deber a problemas de inseguridad, el robo de productos y desperdicios por malas prácticas de recolección o producción de alimentos. Estas estructuras encadenadas son vulnerables a la incidencia de los efectos del cambio climático, los desastres naturales, la inestabilidad política, los ciber ataques, la contaminación, las guerras y la situación de salud de la población, todo esto hace que se necesite fortalecer esta estructura de manera urgente.

Por lo tanto, es posible proponer soluciones en muchos lugares dentro de esta estructura, en tanto la cadena de valor no termina cuando los productos son consumidos, pues hay un problema por resolver al momento de gestionar los desperdicios que se generan. Es en este lugar donde se ha encontrado una brecha importante y se enfocarán los esfuerzos de esta tesis. Las estadísticas indican que entre el 30% y el 50% del total de productos cosechados o procesados nunca llegan a ser consumidos. Esto quiere decir que no solo se generan residuos cuando son consumidos, sino que hay otros lugares dentro de esta estructura en donde los alimentos con potencial de ser consumidos se convierten en desperdicios [23]. En la Figura 8 se muestra de forma global el flujo de desperdicios en cada uno de los eslabones de la cadena de valor agroalimentaria, desde el cosechado y producción de alimentos, hasta su uso en actividades diarias cotidianas, como la preparación de alimentos en casas y restaurantes, o su uso en procesos complejos a nivel industrial. En cualquier caso, la generación de residuos debe ser gestionada lo mejor posible [6].



**Figura 4:** Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos.

A continuación, se muestran las alternativas que son usadas en la actualidad para tratar estos residuos.

- **Reducción de residuos en generación:** este método es usado para reducir la cantidad de basura generada en un lugar. En países desarrollados, hasta el 38% del total de la comida cultivada y generada se

desperdicia antes de que llegue a su lugar de destino para ser consumida. Estas cifras son indicadores de alarma que deben ser tenidos en cuenta para reestructurar y mejorar este sector económico, con el fin de hacer un mejor uso de los recursos naturales usados para producir comida. Hoy en día, si cuantificamos este desperdicio y lo asociamos con la cantidad de recursos que son usados para producir estos alimentos, se traduce en que el 21% del agua total usada se malgasta, lo mismo ocurre con el 19% del total de los fertilizantes y el 18% del área total usada para cultivo [24].

- **Donación de comida:** es una alternativa para evitar su desperdicio, y de esta manera, lograr una mejor distribución de este recurso en la sociedad. Esta labor es realizada por un conjunto de instituciones que son patrocinadas por el gobierno, empresas privadas y organizaciones privadas sin ánimo de lucro [25]. La donación puede ejecutarse mediante diferentes métodos, el primero, es su recolección a través de aquellas personas que cultivan o producen los alimentos y que no venden todo lo que recolectan. El segundo, es la recolección de comida que proviene del servicio de restaurantes y bares. El tercero es la recolección de comida a través de mercados y servicios de venta retail, y finalmente, el cuarto es la recolección de comida no perecedera.
- **Vertederos:** la disposición en vertederos es una de las opciones que más se usan para gestionar el manejo de la comida y desperdicios, de acuerdo con un estudio llevado a cabo en el año 2018 [25], el 97% de los residuos de comida terminan en los vertederos. A pesar de ser una buena opción, por la facilidad para su disposición, no es la mejor alternativa en temas ambientales. Lo que ocurre con este método es que, cuando los residuos de comida son enterrados bajo tierra, estos emiten gases efecto invernadero más que cualquier otra de las opciones mencionadas en esta sección. Adicionalmente, el transporte de estos residuos requiere del uso de vehículos pesados, impulsados por motores diésel que recorren largas distancias, lo que hace que aumente la huella de carbono a la atmósfera. Además, los desperdicios producen lixiviados que, al combinarse con el agua de la lluvia, producen aguas de desperdicio con una alta carga de elementos tóxicos que se filtran y se mezclan con las aguas subterráneas [26].
- **Incineración:** es una de las alternativas menos recomendadas para llevar a cabo la disposición final de residuos de comida. En países en donde las normas ambientales no son tan severas, los organismos privados o particulares no son castigados por llevar a cabo estas prácticas, incluso, en pequeñas poblaciones, la administración pública, sobre todo en zonas rurales, usa este método para reducir el volumen de residuos acumulados [27]. En algunas industrias, cuando este tipo de residuos es aprovechado, se usa esta energía calórica para mover turbinas de vapor o intercambiadores de calor. En promedio,  $1kg$  de desechos de comida sólidos se convierten en  $0.51kg$  de  $CO_2$  equivalentes cuando son incinerados [25]. Un estudio realizado en [28] reveló

que la reducción en volumen que se logra, si se usa esta alternativa, es entre un 80% y un 85% del total inicial de los desechos.

- **Digestión anaerobia:** es el método de procesamiento de desechos de comida en el que los microorganismos consumen desechos orgánicos en ausencia de oxígeno. Este proceso genera como resultado principalmente tres productos; metano, dióxido de carbono, y digestato. Este último es el residuo sólido que se extrae para ser utilizado como fertilizante orgánico de baja potencia en la agricultura. A nivel mundial, este proceso ha sido implementado para tratar fuentes de desechos orgánicos como los son las aguas residuales, las fracciones orgánicas de desechos municipales y los residuos de la agricultura. Esta tecnología tiene varias ventajas, como lo son, evitar que se emitan gases contaminantes, efecto invernadero de compuestos orgánicos volátiles al ambiente, estabilizar la materia orgánica antes de verter los desperdicios a fuentes de agua y producir un efluente con buenas calidades para su uso como fertilizante. Sin embargo, la principal ventaja en el uso de esta tecnología es que se produce biogás, una mezcla de  $CH_4$  y  $CO_2$ , el cual se puede almacenar para producir energía calórica, usando unidades de cogeneración o energía eléctrica. La capacidad de generación de energía calórica de esta tecnología se encuentra en un rango de entre los 21300 a  $23400 km^{-3}$  [7].

Respecto a la digestión anaerobia, la mono digestión, en donde solo se usa una fuente de materia prima, presenta algunos problemas con sus propiedades fisico-químicas, que impiden una producción constante de biogás, y en algunos casos con su disponibilidad, ya que no es posible tener que disponer de la materia prima de manera continua. Por ejemplo, los lodos de las depuradoras se caracterizan por tener una baja carga orgánica, lo cual hace que se limite la producción de biogás. El estiércol de los animales, por ejemplo, tiene baja carga orgánica y una alta concentración de nitrógeno, en consecuencia, el proceso de metanogénesis tiene un bajo rendimiento debido a que con frecuencia se presentan inhibiciones para el grupo de bacterias metanogénicas. De igual forma, la fracción orgánica de las basuras municipales tiene una gran cantidad de materiales impropios como los metales. Asimismo, los residuos procedentes de mataderos de animales tienen grandes inconvenientes porque la materia prima contiene altas concentraciones de nitrógeno. En cuanto a la disponibilidad, es claro que los residuos de la industria agrícola llegan al reactor sin una periodicidad definida, debido a que su generación depende de la ventana temporal de cultivo u otros factores dentro de la cadena de valor agroalimentaria como la logística. Muchos de estos problemas que se presentan al usar un solo sustrato se solucionan cuando se adiciona un segundo sustrato a la mezcla. Este proceso se denomina co-digestión anaerobia, la cual permite incrementar la producción de biogás de manera significativa [29]. El objetivo de la co-digestión es entonces producir una mayor cantidad de metano si se compara con la capacidad de producción que se tendría si se usaran dos reactores por separado, cada uno con un sustrato diferente. En consecuencia, el uso de un solo reactor

conlleva a que el proceso sea económicamente más rentable.

Para poder implementar un proceso de co-digestión deben cumplirse las siguientes condiciones [30]:

- El costo de transporte de esta segunda materia primera, desde la generación hasta el reactor debe ser bajo.
- La selección de un co-sustrato debe favorecer la sinergia con el sustrato primario para lograr una mayor producción de metano.
- El co-sustrato propuesto debe tener una capacidad de diluir compuestos que sean tóxicos para el proceso e inhiban la producción de metano.
- Se debe garantizar que la calidad del digestato no disminuya.

Por las motivaciones expresadas anteriormente, el interés en publicar en esta área de los bioprocesos se ha incrementado en los últimos años tal y como se muestra en la Figura 5.

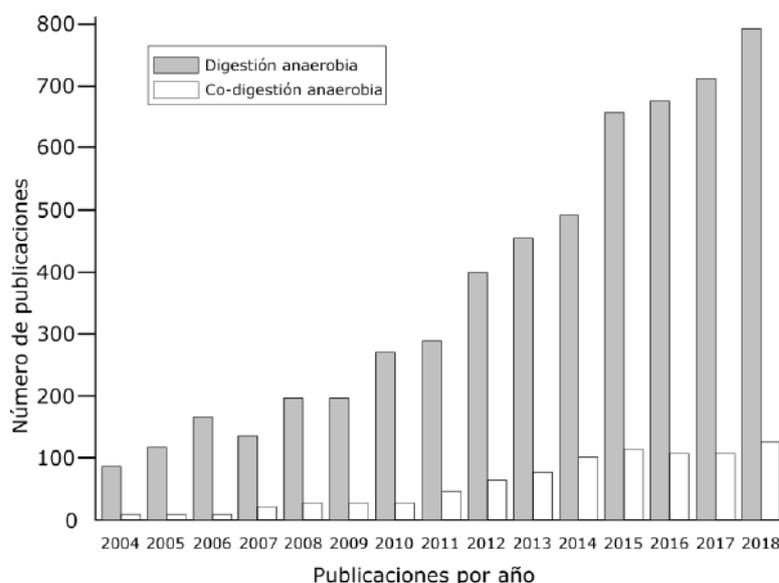
Además, el interés de investigar en esta área también se debe a que la co-digestión anaerobia permite incrementar la viabilidad económica de estos reactores para que produzcan una cantidad mucho mayor de metano.

En principio, los aportes científicos se centraron en evaluar el desempeño de las mezclas de sustratos en los que se quería comprobar que el rendimiento del reactor fuera mejor. Lo que se evaluaba en estos casos era cómo se comportaba el sistema de acuerdo con el equilibrio de los macro y micronutrientes, el balance de humedad y la concentración de compuestos tóxicos o inhibitorios.

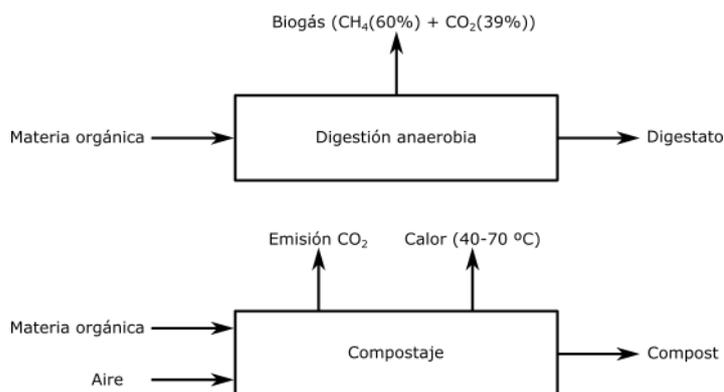
En la siguiente sección se introducirán los conceptos básicos de digestión anaerobia que nos permitirán conocer los rasgos generales del proceso.

### **2.3 Aspectos generales de la digestión anaerobia**

En la actualidad, la digestión anaerobia y el compostaje, son consideradas las alternativas tecnológicas que permiten hacer un buen manejo de los residuos provenientes de la basura orgánica y el reciclado de nutrientes. La digestión anaerobia es un proceso biológico que tiene como objetivo convertir materia orgánica en biogás y digestato. Este proceso degrada varios tipos de basura orgánica, entre los cuales se encuentran biomasa lignocelulosa, residuos de comida, estiércol y aguas residuales. El biogás contiene principalmente metano, producto usado, entre otros, como fuente de energía para producir calor o corriente eléctrica y evitar el uso de fuentes de generación de energía fósiles [15]. Por otro lado, el digestato contiene nutrientes que son usados para la adaptación y corrección de suelos. Usar la digestión anaerobia no solamente reduce los riesgos medioambientales asociados a las basuras orgánicas, sino que también promueve la seguridad alimentaria y el uso eficiente de recursos naturales, ver Figura 6.



**Figura 5:** Publicaciones por año con la palabra digestión y co-digestión anaerobia en el título [1].

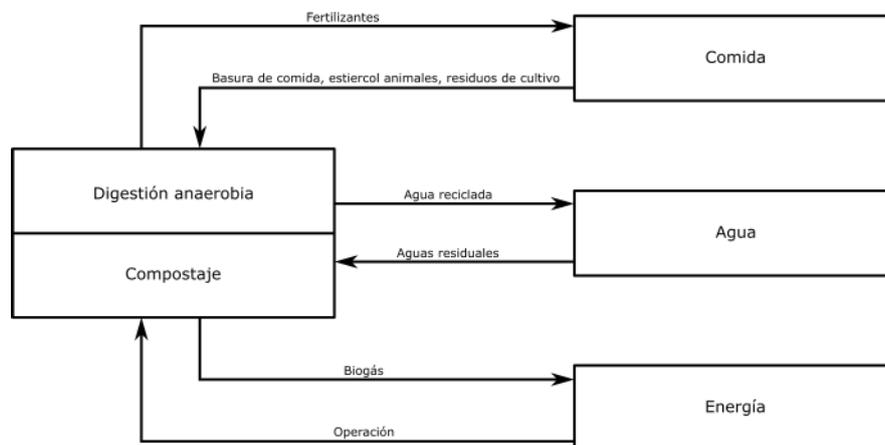


**Figura 6:** Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos [1].

El compostaje es otro método de uso de residuos de basura orgánica que reduce la cantidad de basura en los vertederos. Este proceso de digestión aerobia descompone la basura orgánica para producir compost, además de liberar energía en forma de calor y dióxido de carbono, ver Figura 6. La Figura 7, muestra en general, cómo funciona el proceso de digestión de basura orgánica. Para el proceso de digestión anaerobia, la materia orgánica ingresa al reactor y se produce en estado gaseoso biogás, una composición que por lo general tiene una proporción de 60% metano ( $CH_4$ ) y un 39% dióxido de carbono ( $CO_2$ ). Como subproducto en estado sólido se produce digestato. Para el caso de un depósito de compostaje al sistema ingresa agua y materia orgánica. Los productos que se generan son dióxido de carbono  $CO_2$  y radiación en forma de calor (en un rango de temperatura de entre 40 °C y 70 °C). El producto en estado sólido que se genera es el compost. Finalmente, en la Figura 7 se muestra cómo son requeridos los el-

elementos comida orgánica, agua y energía para hacer funcionar los sistemas de digestión anaerobia y compostaje. A su vez, se explica de qué manera retornan estos elementos. Los productos que se generan son fertilizantes, agua reciclada y biogás [15].

En la Tabla 2 se muestran las ventajas y desventajas en el uso de las tecnologías de digestión anaerobia y de compostaje para el tratamiento de residuos orgánicos. De acuerdo con lo aquí presentado, la digestión anaerobia tiene problemas de estabilidad por inhibición debido a la generación de sustancias como el amonio, lo que conduce a una baja en el rendimiento de producción de biogás. La tecnología de compostaje produce como subproductos la emisión de gases efecto invernadero y polución en el aire. Adicionalmente a ello, se requiere de un suministro energético constante durante el tiempo de operación del dispositivo para soportar el sistema de aireación o mezclado, generando una energía neta producida negativa. A diferencia en la instalación de sistemas de digestión anaerobia, el uso de la tecnología de compostaje requiere de un área muy grande para su funcionamiento. Adicionalmente, el compostaje genera lixiviados, lo que constituye una desventaja adicional si existen dificultades para el procesamiento de estos residuos. El uso de la digestión anaerobia con residuos orgánicos, a pesar de tener un tiempo de degradación y producción de biogás relativamente lento, requiere un suministro bajo de energía para el mantenimiento de la operación del sistema, produciendo más energía de la que consume y una reducción de los olores. En estos sistemas, si se quiere aprovechar el uso del digestato generado, se debe llevar a cabo un tratamiento posterior para su uso.



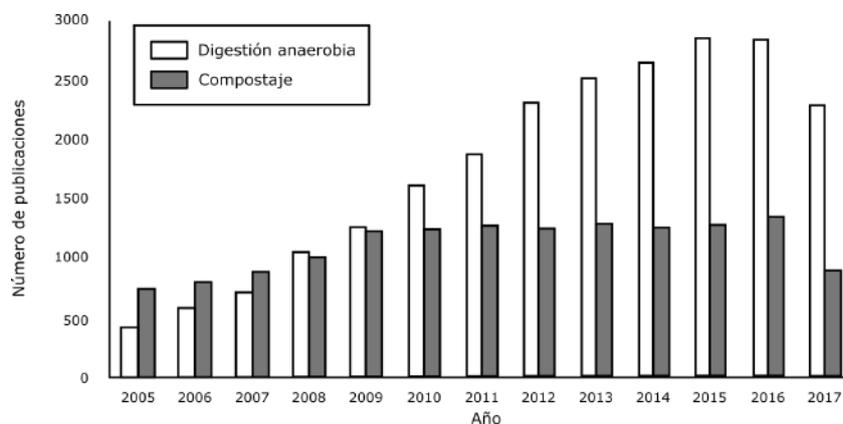
**Figura 7:** Diagramas, digestión anaerobia y compostaje; procesos y productos.

Dado que en el proceso de compostaje se degradan los residuos orgánicos a mayor velocidad, la inversión necesaria para instalar este tipo de sistemas es mucho menor comparada con la tecnología de digestión anaerobia. Además, como resultado de este proceso, se obtienen materiales sólidos para la restitución de nutrientes del suelo como material de enmienda y compost. Sin embargo, a pesar del alto costo de inversión en la digestión anaerobia, se ha

	Ventajas	Desventajas
Digestión anaerobia	Pequeña área para instalación Reducen olores Energía neta producida positiva	Degradación relativamente baja Sistema inestable Alto costo de inversión Posterior tratamiento del digestato
Compostaje	Rápida degradación Bajo costo de inversión Generación compost sólido Producción enmienda de suelos	Área de instalación grande Contaminación de olor Emisión de gases efecto invernadero Producción de lixiviados Energía neta producida negativa

**Tabla 2:** Ventajas y desventajas de la digestión anaerobia y del compostaje.

demostrado que esta tiene el potencial de manejar los problemas de inestabilidad en operación para la óptima producción de biogás, lo que permite viabilizar su implementación [31]. Al respecto, se han enfocado todos los esfuerzos en mejorar el rendimiento en la operación de los sistemas de digestión anaerobia, en especial, se ha investigado ampliamente las estrategias para reducir la concentración de amonio, debido a que es uno de los principales causantes de la reducción en la producción de biogás. En general, los microorganismos metanogénicos, responsables de la producción de metano, son menos tolerantes a los compuestos inhibitorios que los otros grupos de bacterias del consorcio microbiano [15]. Por esta razón, la comunidad científica se ha enfocado en discutir los efectos inhibitorios generados por  $H_2S$  (ácido sulfídrico) y el  $NH_3$  (amoníaco). Entre las alternativas que han sido usadas se encuentra la remoción de amonio con el método de extracción de amonio, intercambio de iones [5] y el proceso de contacto por membrana [32]. Los métodos de adaptación de microorganismos y co-digestión [33] son posibilidades adicionales. Asimismo, diferentes estudios han logrado mejorar la eficiencia de los sistemas de digestión anaerobia adicionando sales de hierro o moderando el suministro de oxígeno dentro del reactor [34]. Además, se ha propuesto la remoción del ácido sulfúrico en el biogás y no sobre el proceso de digestión mientras no se excedan las condiciones de inhibición [5].



**Figura 8:** Número de publicaciones con palabras clave en el título Google Scholar.

Durante los últimos 15 años, el número de publicaciones relacionadas con di-

gestión anaerobia se ha incrementado drásticamente, a diferencia del campo de investigación en compostaje, que ha permanecido constante durante ese periodo de tiempo (ver Figura 8). Cuantificar el número de publicaciones en las dos áreas de investigación permite visualizar cuál es el interés de la comunidad científica y de la industria sobre estos temas. De este modo, los estudios científicos han determinado que la digestión anaerobia tiene ventajas significativas comparado con el proceso de digestión aeróbica [35], principalmente en la capacidad de degradar sustratos complejos y de altas concentraciones, produciendo una baja cantidad de lodos residuales y con requerimientos de energía bajos.

Sin embargo, a pesar de las grandes ventajas que representa el uso de la digestión anaerobia, el debate se centra en por qué no existe un uso masivo de esta tecnología para tratar los residuos de materia orgánica. Desde el punto de vista operacional, este sistema es muy sensible ante los cambios en las condiciones de operación y las perturbaciones externas, sobre todo cuando se lleva el reactor a zonas de máxima producción de metano. Entonces, el hecho de mantener el sistema dentro de valores operacionales lejos de zonas de inestabilidad se convierte en un reto. Por esta razón, el uso de sistemas de control en reactores de biodigestión tiene un gran interés por parte de la comunidad científica.

En la Tabla 3 se observan las diferencias en las cantidades de metano ( $CH_4$ ) que producen las dos tecnologías. La digestión anaerobia se produce en mucha mayor cantidad, un 53% a un 70% del volumen total del gas, dependiendo del tipo de reactor y de las condiciones a las que este opere. Mientras tanto, el compostaje produce entre un 0.1% y un 1.2 % del volumen total del gas. La misma diferencia se mantiene con la cantidad de dióxido de carbono ( $CO_2$ ) que se produce, entre un 30% a un 50% del volumen total del gas se produce para el caso de la digestión anaerobia y entre un 0% a un 10% del volumen total del gas se produce para el caso del compostaje. Para el caso del nitrógeno ( $N_2$ ) ocurre lo contrario, las diferencias se revierten. La producción de este gas, si se usa compostaje, oscila entre un 70% a un 75% del volumen total del gas. Mientras que para el caso de la digestión anaerobia se produce entre un 2% a un 6% del volumen total del gas. En el caso del oxígeno ( $O_2$ ), la producción, usando digestión anaerobia, oscila entre un 0% y un 5% del volumen total del gas. Para el caso del compostaje los valores oscilan entre un 5% y un 21% del volumen total del gas. Los gases restantes que aparecen en la tabla; hidrógeno ( $H_2$ ), amoníaco ( $NH_3$ ), ácido sulfídrico ( $H_2S$ ), óxido nitroso ( $N_2O$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ), y los compuestos orgánicos volátiles ( $VOCs$ ), tienen una participación muy baja en porcentaje dentro de la composición para cada uno de los gases. En la Tabla 4 a continuación se detalla la cantidad de emisiones que resultan en el proceso de aprovechamiento de los gases producidos por las dos tecnologías. En el caso de la digestión anaerobia, cuando se almacena o se utiliza el biogás para producir energía en forma de calor o electricidad, alrededor de un 0.4% y un 2.4% del total del  $CH_4$  producido se desperdicia. La manera de controlar esta fuga es a través de su combustión. Para cuando

Composición	Unidades	Biogás	Gas compostaje
CH <sub>4</sub>	vol%	53-70	0.1-1.2
CO <sub>2</sub>	vol%	30-50	0-10
N <sub>2</sub>	vol%	2-6	70-75
O <sub>2</sub>	vol%	0-5	5-21
H <sub>2</sub>	vol%	0-3	-
NH <sub>3</sub>	ppm	<100	0-4100
H <sub>2</sub> S	ppm	0-2000	0-7
N <sub>2</sub> O	ppm	-	0-120
CO	ppm	-	0-100
VOCs	μg/g-dry	<0.08-0.5	0.3-8

**Tabla 3:** Composición típica de biogás y gas generado por compost.

se necesite tratar el gas producido en procesos posteriores, el compostaje se convierte en la mejor alternativa para su mitigación.

Para el caso en el que se quiera aplicar el gas directamente en los suelos para mejorar la composición de nutrientes, se liberan distintas cantidades de gas al ambiente dependiendo de las prácticas agrícolas utilizadas. En el caso del compostaje, diferentes proporciones se pierden del total de gases producidos (ver Tabla 4). Las estrategias de mitigación usadas para esta tecnología son la conexión en serie de una unidad de depuradoras de ácidos, el uso de biofiltros, la mejora en el método de aireación y el uso de aditivos.

Fuentes de emisión	Cuantificación de emisiones	Estrategias de mitigación
Digestión anaerobia		
Utilización del biogás	0.4-2.4% del total de CH <sub>4</sub> producido	Llama
Almacén de digestato	0.4-2.4% del total de CH <sub>4</sub> producido	Almacenamiento cubierto
Post-tratamiento	Depende del método usado	Compostaje
Aplicación en suelos	65% de la pérdida inicial de Total Ammonia Nitrogen (TAN) como NH <sub>3</sub> ; 10% de la pérdida inicial de TAN como NO <sub>2</sub> ; menores emisiones de CH <sub>4</sub> y N <sub>2</sub> O	Inyección de digestión Mejores prácticas agrícolas
Compostaje		
Proceso compostaje	9.6-46% de la pérdida inicial de (Total Nitrogen) TN como NH <sub>3</sub> ; 0.2-10% de la pérdida inicial de TN como N <sub>2</sub> O; >50% de la pérdida inicial de TC como CO <sub>2</sub> ; 8% de la pérdida inicial de TC como CH <sub>4</sub> ; 0.1% de la pérdida inicial de TC como VOCs 4-18% del sulfuro inicial se pierde	Depuradores de ácidos Biofiltro Mejora de aireación Uso de aditivos

**Tabla 4:** Fuentes de emisiones asociadas a las estrategias de mitigación de digestión anaerobia y compostaje.

En la sección siguiente se explican las estrategias que se usan habitualmente para mejorar el rendimiento en el proceso de digestión anaerobia. Es muy importante entender esta parte del proceso debido a que la materia orgánica que ingresa al reactor es alterada para que la producción de metano aumente, y a su vez, sea factible económicamente la construcción y operación de estos reactores.

## 2.4 Incremento en la producción de metano

En esta sección se conocerá cuáles han sido los esfuerzos de investigación para mejorar la capacidad de producción de biogás en un reactor anaerobio, específicamente la materia prima que es ingresada al reactor. En principio se estudiarán las propiedades de la lignocelulosa, unos compuestos que están presentes en la materia prima orgánica que ingresa al reactor, y de qué manera este elemento es aprovechado para generar biogás debido a que las bacterias presentes en el proceso no son capaces de degradar estos compuestos y producir metano. De igual manera, se discutirá qué otros métodos se usan para mejorar el proceso de digestión anaerobia en otra de las etapas del proceso.

### 2.4.1 Potencial de generación de metano en la lignocelulosa

Los compuestos recalcitrantes como la lignina, la hemicelulosa y la celulosa están presentes en una gran cantidad de residuos dentro de la materia prima orgánica. El inconveniente con estos compuestos es que las bacterias presentes en el bioproceso no son capaces de degradar eficientemente estos elementos, en consecuencia, la eficiencia en la producción de metano no supera el 60 % del valor teórico [34]. Las investigaciones han demostrado que la conversión de materiales que contengan lignocelulosa y se conviertan en metano limitan el proceso de hidrólisis, que en otras palabras, se restringe el proceso de transformación del sustrato en compuestos más simples. Estos compuestos se encuentran comúnmente en los residuos de jardinería y cáscaras de muchas frutas y verduras, debido a que la lignocelulosa forma la estructura principal de la pared celular de la planta. La composición de esta estructura depende fundamentalmente de la especie de la planta y de su edad. La lignina es un compuesto de difícil procesado y degradado, lo cual limita la degradación de la celulosa. En estos compuestos prevalece el carbono y el nitrógeno, elementos fundamentales para la obtención de energía en estos procesos. El carbono es una de las fuentes de obtención de energía para los procesos metabólicos de las bacterias y el nitrógeno mejora la velocidad de crecimiento de las bacterias. Por lo tanto, si la cantidad de nitrógeno es reducida, las poblaciones de bacterias no son altas, lo que hace que se necesite más tiempo para descomponer el carbono presente en el sustrato. Este es uno de los problemas que ha sido foco de investigación en los últimos años [36]. Al respecto, han sido desarrolladas varias técnicas, tanto físicas como químicas, para intentar resolver este inconveniente. Las estrategias de pretratado mejoran en gran proporción la digestibilidad de la biomasa de lignocelulosa, debido a que se insertan los microorganismos específicos para acelerar su degradación. De esta forma, se logra la cristalinidad de la celulosa, lo que permite incrementar la porosidad de la biomasa. Cabe resaltar que, los métodos que sean propuestos para lograr este objetivo deben cumplir con los siguientes criterios de desempeño para poder ser implementados:

- Bajo costo operacional y baja inversión de capital.

- Debe ser efectivo en un amplio rango y tipos de materiales que contengan lignocelulosa.
- Deberían evitar la degradación de los productos solubilizados.
- No deberían producir degradación de los productos que inhiben el crecimiento de los microorganismos fermentativos o la acción de las enzimas hidrolíticas [36].

A continuación se listan los tratamientos que más se usan a nivel investigativo e industrial.

- Físicos: mecánicos y térmicos.
- Químicos: hidrólisis alcalina.
- Físico químicos.
- Biológicos: Por medio del uso de microbios o enzimas.

En el caso de los tratamientos físicos, utilizando una estrategia hidrotermal seguida por la adición de una base de NaOH al 5%, el estudio realizado por Rubia. Estos autores demuestran que es posible mejorar la producción de metano proveniente del arroz al pasar de un valor de  $0.06 L_{CH_4}gVS^{-1}$  a  $0.13 L_{CH_4}gVS^{-1}$ . Por otro lado, los métodos biológicos suponen una ventaja debido a que no requieren energía y no generan contaminantes tóxicos que reduzcan la eficiencia de la mezcla dentro del reactor. Estos métodos usualmente utilizan agentes biológicos tipo fungi u otros consorcios microbianos o enzimas específicas que hacen posible incrementar la eficiencia en la producción de metano hasta un 126% [37].

Cabe anotar que es posible incrementar la eficiencia en la producción de metano a través de otros métodos, sin embargo, estos tienen un alto costo. A continuación, se explican las alternativas más utilizadas para mejorar los índices de producción de metano en reactores biológicos.

- **Co-digestión anaerobia:** Debido a que la relación carbono/nitrógeno es bastante alta en sustratos de lignocelulosa, estos se usan en co-digestión con otros sustratos ricos en nitrógeno con el objetivo de incrementar la capacidad de buffering del reactor, y, por lo tanto, aumentar la capacidad de generación de metano [38]. En la naturaleza, el estómago de las vacas es considerado uno de los mejores sistemas de producción de metano, debido a que el procesado de biomasa de lignocelulosa se lleva a cabo por microorganismos fungi y consorcios de bacterias metanogénicas. Entonces, una muy buena alternativa para plantear una mejora de estos procesos a nivel industrial es utilizar a estos microorganismos y enzimas alojadas en estos animales como un co-sustrato para procesar el material que contiene lignocelulosa.

- **Estrategias de inoculación:** durante el proceso de arranque del reactor se usa un material, llamado también material semilla, para potenciar la producción de biogás y evitar así un arranque lento, permitiendo que el proceso sea estable y eficiente en un tiempo reducido. Esta estrategia tiene como objetivo poder seleccionar los microorganismos capaces de degradar una gran diversidad de sustratos. Además, si dentro del reactor existe una alta densidad de bacterias con una alta dinámica de digestión, esta es la estrategia más adecuada para soportar la sobrecarga o la acumulación de ácidos grasos volátiles que pueden estar presentes durante la operación del reactor. Sin embargo, debido a la gran capacidad que tienen los microorganismos de metabolizar la lignocelulosa, la acumulación de ácidos grasos volátiles puede afectar la estabilidad del reactor.

En la sección siguiente se explican los conceptos básicos que deben conocerse en el proceso de digestión anaerobia porque son determinantes para que el reactor funcione adecuadamente. La correcta manipulación de estos elementos hace que aumente considerablemente la producción de metano y también sea posible mantener el reactor por fuera de regiones no factibles de operación.

## 2.5 Conceptos básicos de digestión anaerobia

A manera de resumen, se puede definir al proceso de digestión anaerobia como un proceso bioquímico en el que los microorganismos (bacterias), consumen residuos orgánicos en ausencia de oxígeno y tiene como resultado la producción de tres elementos de interés: el metano, el dióxido de carbono y el digestato. Por un lado, el metano es usualmente usado para la producción de energía, en tanto el digestato es un residuo sólido similar al compost de baja efectividad que es usado como suplemento de fertilizante en la agricultura. A continuación, se resumen los conceptos básicos de la operación de un reactor de digestión anaerobia.

### 2.5.1 Tratamiento previo del sustrato

Con el fin de producir energía de manera eficiente, el sustrato debe ser tratado para que este tenga una mayor capacidad de producción de metano. Hay que aclarar que, a pesar de que el reactor biológico trabaje con residuos provenientes de la misma fuente, no es posible que este tenga las mismas propiedades físico-químicas en todo momento, lo que hace que el rendimiento de este tipo de sistemas sea variable. Esta materia prima proviene comúnmente de los desechos producidos por las zonas residenciales, centros de trabajo e investigación como hospitales y universidades, el comercio, como centros comerciales o núcleos logísticos, el sector del turismo, sectores específicos como centros de procesamiento de vinos, almazaras, donde se produce el aceite de oliva, entre muchos otros lugares. El primer paso entonces consiste en separar el material que no es orgánico del material orgánico. Entre los materiales no orgánicos encontramos metal, vidrio, plástico, rocas, tierra, entre los más comunes. Este proceso se logra mediante separación usando

métodos primarios, como lo son las tecnologías de imanes, rejillas de separación o personal dedicado a esta labor. Una vez este material residual ha sido extraído, la materia prima restante se comprime con el objetivo de aumentar el área de contacto entre las partículas, y por lo tanto, la interacción entre las bacterias en su correspondiente sustrato.

### 2.5.2 Temperatura dentro del reactor

Uno de los parámetros que más inciden en el proceso de digestión anaerobia es la temperatura, debido a que diferentes rangos de temperatura generan diferencias en la eficiencia del proceso. En este sentido, pequeñas variaciones en la temperatura de tan solo unos grados pueden tener efectos muy graves en el bienestar de las bacterias, por lo tanto, en la estabilidad del proceso. Dicha estabilidad afecta la velocidad de digestión de los sustratos y la capacidad de producción de metano. Para producir metano de una manera eficiente, se debe mantener la temperatura en niveles óptimos para el tipo de microorganismo con el que se está trabajando [39]. Para cada uno de los dos tipos de bacterias que más comúnmente se encuentran en estos reactores, existe un rango de operación de la temperatura. El primer grupo de bacterias es el mesofílico, cuyos microorganismos trabajan en un rango de temperatura entre los  $35^{\circ}\text{C}$  hasta los  $45^{\circ}\text{C}$ . Para el caso del grupo de bacterias termofílico, los microorganismos trabajan en un rango de temperatura de entre los  $51.5^{\circ}\text{C}$  hasta los  $57.5^{\circ}\text{C}$ . Las bacterias mesofílicas y termofílicas ofrecen distintas dinámicas de consumos de sustrato y de degradación de aminoácidos y proteínas en el proceso de digestión anaerobia. Por esta razón, es fundamental conocer cómo se comportan estos grupos de bacterias en estos rangos de operación. Esto permite saber cuál debe ser el rango de operación de temperatura más conveniente para operar. Aparte de los rangos de temperatura, existen algunas diferencias entre estos dos grupos poblacionales. Primero, las bacterias Termofílicas llevan a cabo una digestión anaerobia más eficiente del sustrato que ingresa al reactor, además, reduce significativamente la cantidad de patógenos que sobreviven a este proceso [40]. Sin embargo, cambios en la temperatura hace que en cuestión de minutos la producción de metano se detenga y muera una cantidad significativa de microorganismos. Por otro lado, las bacterias Mesofílicas son mucho más tolerantes a los cambios de temperatura que las bacterias Termofílicas. No obstante, este grupo de bacterias no digiere el sustrato dentro del reactor tan eficientemente como lo hacen las bacterias Termofílicas.

### 2.5.3 Tiempo de retención orgánico

Para iniciar el proceso, el primer paso es introducir la materia prima dentro del depósito externo que se conecta con la parte interna del reactor, en ese momento, este material es mezclado con agua. El tiempo de retención orgánico (OLR por sus siglas en inglés), se refiere específicamente a la cantidad de material orgánico presente por unidad de volumen dentro del reactor. Las unidades que lo representan son  $\frac{g}{L}d$ , donde  $g$ ,  $L$  y  $d$  son los gramos, litros y días respectivamente. El valor óptimo que se calcula

de OLR depende de la naturaleza de los sustratos contenidos dentro de la mezcla y cómo esta será tratada. Este valor es un parámetro fundamental en la producción de biogás. Un incremento en la concentración de sustratos genera un incremento en el valor del OLR, esto puede mejorar la producción de biogás, sin embargo, altas concentraciones de sustrato pueden generar inhibiciones en el sistema [5]. Para una concentración particular de influente, se puede usar el término tiempo de retención hidráulico para calcularlo.

$$OLR = \frac{S_0}{HRT} = S_0 \frac{Q}{V_d}, \quad (1)$$

donde  $S_0$ ,  $Q$  y  $V_d$  son la concentración del sustrato en el influente, la tasa de flujo y el volumen dentro del reactor respectivamente. La variable  $HRT$  se define como el intervalo de tiempo promedio sobre el cual el sustrato se mantiene dentro del reactor. Como se muestra en la anterior fórmula, el valor de OLR puede ser incrementado no solo aumentando el valor del flujo promedio en el influente ( $Q$ ), también se puede lograr incrementando el valor de  $S_0$ . Siempre que no haya inhibición por sobrecarga de sustrato, mientras el valor del OLR se incrementa, la producción de biogás también lo hará. Además, es fundamental garantizar una buena calidad del mezclado dentro del reactor. Algunos reactores utilizan aspas para lograr este propósito, lo que hace que la velocidad promedio de digestión bacterial aumente. Sin embargo, en algunas ocasiones estos fallan debido a rupturas por el desgaste mecánico. Como alternativa, otros digestores emplean aireadores con oxígeno comprimido o biogás inyectado dentro de la mezcla del reactor para generar el mezclado. En contraste, algunos digestores anaerobios no utilizan ningún tipo de mezclado mecánico; estos se soportan en la fuerza de gravedad para lentamente empujar las partículas sólidas a través del reactor desde la parte superior hasta el fondo, permitiendo una completa digestión de las partículas.

En la sección siguiente se explican las fases consecutivas que componen el proceso de fermentación anaerobia, las correspondientes poblaciones de bacterias, sustratos y los productos resultantes. Cada grupo poblacional se caracteriza por trabajar con distintas velocidades de crecimiento y presentar sensibilidades diferenciadas a los distintos componentes tóxicos que inhiben las reacciones.

## 2.6 Etapas de la digestión anaerobia

Desde el punto de vista bioquímico, puede considerarse que el proceso de digestión anaerobia consta de cuatro etapas, las cuales se listan y explican a continuación (la numeración a continuación está relacionada con las etapas enumeradas en la Figura ). En la Figura 9 se muestra un esquema en el que se detalla la sucesión de etapas que tienen lugar, así como la interacción entre los diferentes compuestos. De acuerdo con [41] la velocidad global del proceso se determina por la etapa limitante, que será la metanogénesis, que además se puede inhibir con facilidad debido a los cambios (especialmente la reducción) en el valor del pH, o debido a la presencia de diversos compuestos:

1. **Hidrólisis:** se trata de la ruptura de la biomasa inicial en complejos más simples para facilitar el metabolismo bacteriano. Los polímeros iniciales se solubilizan en sus respectivos monómeros mediante enzimas que segregan las propias bacterias, por lo que se considera que esta es una etapa que tiene lugar de forma extracelular.
2. **Acidogénesis:** en esta fase las bacterias acidogénicas metabolizan la materia orgánica soluble procedente de la hidrólisis, generando ácidos grasos volátiles que van desde el ácido acético hasta el ácido valérico, principalmente. Durante esta etapa se produce una disminución del valor del pH en el medio, por lo que esta etapa también es conocida como fermentación ácida, aunque al convertirse unos productos orgánicos en otros, la demanda química de oxígeno (DQO) no se ve muy alterada. En ocasiones se subdivide esta fase en otra llamada acetogénesis, durante la cual se produce ácido acético,  $H_2$  y  $CO_2$  a partir del resto de AGV de cadena más larga Shuzhen.
3. **Acetogénesis:** este proceso resulta en la conversión de ácidos orgánicos en acetato y otros productos tales como hidrógeno y dióxido de carbono. Estas reacciones son posibles desde el punto de vista termodinámico cuando la concentración de hidrógeno en el digestor es baja. Esto resulta en una dependencia obligatoria de estas bacterias en las arqueas metanogénicas o en otros organismos depredadores para que sea posible la eliminación del producto. El acoplamiento de relaciones sintróficas de productores y consumidores de hidrógeno es llamado transferencia de hidrógenos entre especies. Los organismos acetógenos dependen del consumo de hidrógeno, formiato y acetato. Las especies acetogénicas se dividen en aquellas que obligatoriamente no son reductores de protones, lo que lleva a una producción de hidrógeno. Los ácidos orgánicos y los alcoholes producidos durante la etapa de fermentación son oxidados y convertidos en acetato por la producción de hidrogenada de acetógenos. Los electrones producidos debido a esta reacción de oxidación son transferidos a protones  $H^+$  para producir  $H_2$  o bicarbonato para producir formiato. Los acetógenos que oxidan los ácidos orgánicos obligatoriamente usan iones de hidrógeno y dióxido de carbono como un aceptor de electrones.
4. **Metanogénesis:** las arqueas metanogénicas son los microorganismos que pertenecen a esta fase, en la que, a partir de ácido acético  $H_2$  y  $CO_2$  se produce biogás. Para obtener el biogás existen dos rutas metabólicas. La primera, la realizan las metanogénicas hidrogenotróficas, empleando  $H_2$  y  $CO_2$  como sustratos, mientras que en la segunda vía, los microorganismos metanogénicos acetoclásticos degradan ácido acético, siendo esta la vía principal de obtención de metano [42]. Las ecuaciones a continuación muestran cómo se produce el metano en esta etapa.



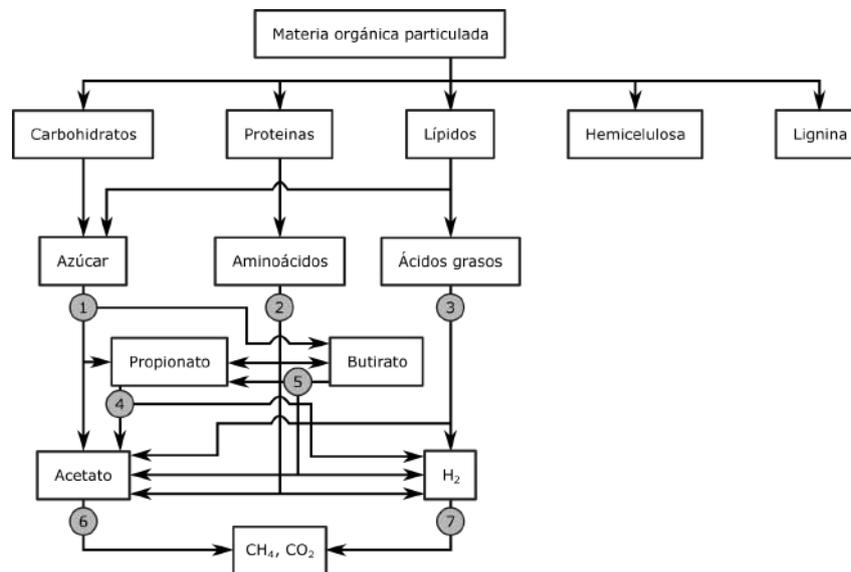


Figura 9: Digestión anaerobia dentro de un reactor.

## 2.7 Resumen

En este capítulo se estudió el proceso de digestión anaerobia para entender el proceso por el cual los microorganismos interactúan con la materia orgánica para producir biogás y digestato. Se demostró que es la mejor opción que existe en la actualidad para tratar este tipo de residuos y generar un impacto ambiental positivo que se ajusta a las nuevas normativas del cambio climático. La materia orgánica puede provenir de diferentes fuentes; procedente de los residuos de la agricultura, la crianza de animales, de la basura proveniente de las ciudades y las aguas residuales. Sin importar su procedencia, este material debe ser tratado físicamente para poder separar el material que no reacciona o daña la parte interna del reactor anaerobio. Una vez se tenga el material que será procesado, diferentes técnicas son usadas para aumentar la capacidad de degradación que tienen los grupos poblacionales de bacterias para generar los productos, entre ellos el biogás. Desde el punto de vista bioquímico se estudiarán las cuatro etapas metabólicas, los grupos de bacterias que componen a cada una de ellas, el sustrato correspondiente y los compuestos que inhiben el medio y hacen que el rendimiento del reactor decrezca. Este capítulo nos permitirá introducirnos en el siguiente contenido de la tesis que se enfoca en seleccionar el modelo de complejidad reducida que mejor se ajuste al proceso biológico, con las consideraciones necesarias para dar explicación al fenómeno, pero con muy poco nivel de detalle que le permita ser usados en implementaciones reales en la industria.

---

## 3 Modelos reducidos para propósitos de control

El objetivo de esta sección es realizar una búsqueda en la bibliografía de un modelo matemático que pueda ser usado para propósitos de monitorización y control en reactores de digestión anaerobia. Por lo tanto, el primer paso consiste en conocer cuáles han sido las aportaciones que se han hecho en el área de modelado de este tipo de sistemas. Se debe conocer, cronológicamente, cuál ha sido el recorrido que han realizado los tres tipos de modelos: modelos de base fenomenológica microscópicos, modelos con base en datos experimentales, y modelos de base fenomenológica de orden reducido.

Como se verá en la sección a continuación, el esfuerzo de los investigadores se ha centrado en explicar cómo era posible, a través de modelos matemáticos, entender los fenómenos biológicos y fisico-químicos que ocurren dentro de las reacciones de digestión anaerobia. Por esta razón, desde mediados del siglo pasado, en cada momento que se encontraba un modelo que daba explicación a una parte del fenómeno con las respectivas consideraciones, se realizaba una publicación. Se llegó a un punto en el que se necesitó crear un modelo de marco de referencia que hiciera posible evaluar objetivamente las investigaciones que se llevaban a cabo en la experimentación [5]. A partir de esa referencia, una rama de la investigación se centró en desarrollar modelos reducidos para propósitos de monitorización y control. También se ha trabajado en el desarrollo de modelos con base en datos que han intentado explicar las no linealidades que tiene el proceso [43].

### 3.1 Introducción

El primer paso para lograr la implementación de un sistema de soporte a la toma de decisión en reactores de digestión anaerobia consiste en desarrollar un modelo matemático que describa la fenomenología de la degradación metabólica de los sustratos, que se lleva a cabo a través de la digestión de la materia orgánica por grupos de bacterias, hasta la producción de biogás (compuesto por metano y dióxido de carbono). Hace ya varias décadas la

comunidad científica e industrial se ha interesado en desarrollar tecnologías que permitan implementar sistemas de supervisión y control en estos sistemas. Por lo tanto, los esfuerzos se han enfocado en entender el fenómeno y formular modelos matemáticos que reconstruyan lo que ocurre, desde la llegada de materia orgánica al reactor hasta la generación de biogás. Los primeros aportes que fueron significativos, en el área del modelamiento matemático, se llevaron a cabo a mediados del siglo pasado [5]. En el año de 1968, Andrews introdujo por primera vez el modelo de Haldane que explicaba el crecimiento de bacterias caracterizado por una inhibición debido a la presencia en exceso de algunos sustratos. Más adelante, en el año de 1974, Graef and Andrews [44] propusieron el primer modelo con un único grupo de bacterias. Luego, en el año de 1977, Hill and Barth plantearon una nueva mejora al proponer tres estados dentro de la reacción; la solubilización de residuos orgánicos, el fenómeno de acidogénesis y la metanogénesis [34]. Más adelante, en el año 1983, Mosey introdujo el modelo que considera cuatro grupos de bacterias; dos de ellas relacionadas con reacciones acidogénicas y dos relacionadas con reacciones metanogénicas. En adelante, una gran cantidad de autores ampliaron el alcance de estos estudios con el objetivo de dar explicación, cada vez con mayores detalles, a la naturaleza del proceso. Esto generó una gran cantidad de propuestas con modelos detallados y un número elevado de grupos de bacterias con los correspondientes sustratos [40, 45, 29]. Un mayor detalle en el modelo generó, por lo tanto, propuestas densas con una gran cantidad de parámetros y variables para medir e identificar [40].

Para la implementación de sistemas de monitoreo y control, usualmente se requiere contar con modelos matemáticos del proceso. Sin embargo, en cuanto crece la complejidad y el nivel de detalle de dichos modelos, se requiere de una mayor cantidad de información para su calibración, es decir, se necesita tomar más mediciones de variables y parámetros a través del uso de sensores, lo cual no siempre es posible. Adicional a ello, existen limitaciones debido a que se presenta una falta de conocimiento de la fenomenología, a la complejidad del proceso y a su naturaleza no lineal, que impiden que los modelos tradicionales se ajusten a la realidad. En consecuencia, surgieron varios modelos con la capacidad de suprimir detalles no relevantes ante la usual falta de información del proceso.

En el año 2001, Bernard et al. [5] incorporaron por primera vez a los modelos propuestos anteriormente el equilibrio electroquímico, con el objetivo de introducir la dinámica de la alcalinidad, fundamental cuando se necesita plantear sistemas de monitorización y control. Esta propuesta logró minimizar el número de supuestos debido a la falta de información, pues compensó el conocimiento sobre las reacciones biológicas dentro del reactor con la inclusión de las cinéticas de reacción. En este sentido, los modelos cinéticos precisos posibilitan la estabilidad de la operación del proceso. Los modelos con una gran cantidad de consideraciones, intentan dar explicación a todos los fenómenos intermedios que ocurren desde la digestión de la materia orgánica hasta la producción de biogás y generación de subproductos

[45]. Por su parte, los modelos de complejidad reducida, como los desarrollados por Bernard et al., centran su interés en la posibilidad de desarrollar sistemas que sean implementables a nivel industrial, lo suficientemente sensibles ante la falta de información del proceso, a su vez, con una cantidad reducida de parámetros. En este sentido se ha demostrado mediante trabajos de simulación, y la comparación de estos con los datos de experimentos en laboratorio, que los modelos basados en balances de masa superan estas dificultades. El uso de estos modelos para el diseño de sistemas de monitoreo y control ha sido probado efectivamente [34] debido a que reducen significativamente el número de consideraciones para plantear sistemas de control efectivos.

Durante estas décadas, una gran cantidad de modelos específicos han sido desarrollados para el control de procesos de digestión anaerobia [46]. Estos trabajos se han enfocado en lograr que el proceso opere continuamente y sea capaz de rechazar perturbaciones que le permitan trabajar dentro de los límites operacionales. Sin embargo, su implementación se ha limitado debido a que existen una gran cantidad de modelos con una naturaleza específica para diferentes condiciones de operación [45]. Por esta razón, en el año 2000, fue puesto en marcha un proyecto que permitió desarrollar un modelo que sirvió como marco común y que trazó los siguientes retos:

- Tener la posibilidad de usar el modelo para llevar a cabo el diseño de reactores de digestión anaerobia, su operación y optimización.
- Diseñar estrategias de optimización y control que hagan posible una implementación de estos sistemas a nivel industrial.
- Desarrollar un modelo que haga posible una base común de trabajo que permita hacer comparaciones y validaciones.

### **3.2 Modelado matemático de digestión anaerobia en reactores**

La base de los bioprocesos es la presencia de microorganismos dentro de un reactor. A diferencia de las reacciones químicas, en la que sus balances estequiométricos son determinísticos, en las reacciones biológicas se establecen las interacciones que se llevan a cabo entre las especies dentro de la mezcla homogénea a través de márgenes de operación. Para ello, a cada uno de los términos de las reacciones independientes que modelan el proceso se le agregan coeficientes, estos valores se ajustan a través de los datos experimentales. Esto permite contar con parámetros variables que se ajustan a la naturaleza de la materia prima que ingresa al reactor, la cual podría variar en el tiempo.

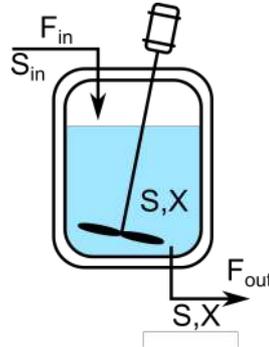
El proceso de modelado de estos sistemas implica, en principio, clasificar las reacciones en dos categorías: las de crecimiento microbiano y las bioquímicas o biotransformaciones. Por un lado, el crecimiento y la estabilidad de los microorganismos depende del apropiado consumo de nutrientes y sustratos

bajo condiciones, como la temperatura y nivel de pH, dentro de límites operacionales. Adicionalmente, el crecimiento celular es influenciado por la presencia de reactantes que se transforman en productos a través de la acción catalítica.

A continuación, se detalla cada uno de los aspectos que debe tenerse en cuenta al momento de desarrollar un modelado matemático para bioprocesos con condiciones de operación, características de sustratos y grupos poblacionales de bacterias específicos.

### 3.2.1 Conceptos básicos

Para sistemas de reacción homogénea (ver Figura 10) para bioprocesos se asume que la mezcla dentro del reactor es homogénea. Por lo tanto, el comportamiento dinámico del crecimiento de las poblaciones de microorganismos, con el correspondiente sustrato, se obtiene mediante la siguiente ecuación (4).



**Figura 10:** Reactor para sistemas de bioprocesos.

$$\frac{d(V_{ol}X)}{dt} = \mu V_{ol}X - F_{out}X, \quad (4)$$

donde  $V_{ol}$ ,  $X$ ,  $\mu$ , y  $F_{out}$  son el volumen dentro del reactor, la concentración de la población de los microorganismos, la velocidad específica de crecimiento bacteriano, y el flujo de salida del reactor respectivamente. Por su parte, la ecuación de acumulación de sustrato en el reactor es la que se muestra a continuación.

$$\frac{d(V_{ol}S)}{dt} = -k_1\mu V_{ol}X + F_{in}S_{in} - F_{out}S, \quad (5)$$

donde  $S$ ,  $k_1$ ,  $F_{in}$ , y  $S_{in}$  son la concentración del sustrato, el coeficiente de la reacción relacionado con el consumo de sustrato por la biomasa, el flujo de entrada al reactor y la concentración del sustrato a la entrada del reactor respectivamente. Finalmente, la variación del volumen se expresa en función de las variaciones de flujo que se presentan a la entrada  $F_{in}$  y salida del reactor  $F_{out}$  como:

$$\frac{dV_{ol}}{dt} = F_{in} - F_{out}. \quad (6)$$

En las ecuaciones (4)–(6) se asume que la tasa de crecimiento de la biomasa  $\mu X$  y el término de consumo de sustrato  $k_1\mu X$  son proporcionales a la concentración  $X$  [47]. Con el fin de mejorar el detalle del modelo, se pueden agregar algunos términos a las anteriores ecuaciones. La dinámica natural de muerte de microorganismos se puede cuantificar con el término  $-k_d V_{ol} X$ . De igual manera, el término  $-k_m V_{ol} X$  representa el consumo de sustrato que necesita la biomasa para mantenerse y sobrevivir. Considerando estos términos adicionales, las ecuaciones (4) y (5) pueden describirse como.

$$\frac{dV_{ol}X}{dt} = (\mu - k_d)V_{ol}X - F_{out}X, \quad (7)$$

$$\frac{dV_{ol}S}{dt} = -(k_1\mu + k_m)V_{ol}X + F_{in}S_{in} - F_{out}S. \quad (8)$$

Sin embargo, en muchas de las investigaciones de laboratorio, trabajos de simulación y experimentaciones industriales, estos términos no son considerados [34]. Por otro lado, se define el índice de dilución (*dilution rate* en inglés) como la proporción entre soluto y solvente. Se usa habitualmente para diluciones simples, en el que una unidad de volumen de un líquido se combina con un apropiado volumen de líquido solvente para lograr una concentración deseada. El índice de dilución puede calcularse como.

$$D = \frac{F_{in}}{V}. \quad (9)$$

Remplazando (9) en (4)–(6) se tiene que.

$$\frac{dX}{dt} = (\mu - D)X, \quad (10)$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_1\mu X + D(S_{in} - S), \quad (11)$$

$$\frac{dV_{ol}}{dt} = DV_{ol} - F_{out}, \quad (12)$$

la cual es la forma como usualmente es expresado este modelo en la literatura. A continuación, se presentan tres diferentes configuraciones de reactores (batch, semibatch y CSTR) y su formalización matemática en relación al modelo presentado en (11)–(12).

**Reactores batch** En los reactores tipo batch o por lotes, el sistema es cargado al principio del proceso y el producto es removido solo hasta el final. En consecuencia, en este tipo de reactores no se cuentan flujos de entrada ni de salida, por lo tanto, se tiene que  $F_{in} = F_{out} = 0$ . Generalmente, estos reactores de bioprocesos se encuentran con altas concentraciones de sustratos y bajas concentraciones de biomasa (inoculo) al inicio de sus operaciones. Pero a medida que el tiempo transcurre, el sustrato disminuye al aumentar la población de bacterias que lo consumen. Dado que durante la operación no ingresa sustrato y no se extrae biomasa, el índice de dilución es  $D = 0$ . Si se quieren obtener más sub-productos, el proceso se debe

reiniciar. Finalmente, las dinámicas para este tipo de reactor se describen como:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X, \quad (13)$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 \mu X, \quad (14)$$

$$\frac{dV_{ol}}{dt} = 0. \quad (15)$$

**Reactores semi-batch** A diferencia del reactor batch, este reactor se caracteriza por permitir una alimentación de sustrato y por no tener flujo de salida, por lo tanto, es decir, que  $F_{out} = 0$ . En este sentido, por lo general el reactor es inicialmente cargado con poca cantidad de sustrato y biomasa. Así entonces, la cantidad de sustrato dentro del reactor es progresivamente suministrada con el flujo de entrada  $F_{in}$  y no se retira la biomasa hasta el final del proceso. De esta forma, las dinámicas para este tipo de reactor se describen como:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X, \quad (16)$$

$$\frac{dS}{dt} = -k_1 \mu X + \frac{F_{in}}{V} S_{in}, \quad (17)$$

$$\frac{dV_{ol}}{dt} = \frac{F_{in}}{V} V_{ol}. \quad (18)$$

**Reactores CSTR** Este tipo de reactores son continuamente alimentados con sustrato, pero a diferencia del semi-batch mantienen el volumen constante dentro del reactor, para ello el flujo de salida es siempre igual al flujo de entrada, esto es  $F_{in} = F_{out} = F$ . De esta forma, la tasa de dilución está dada por  $D = \frac{F}{V}$ . El modelo para este tipo de reactor se puede escribir mediante las ecuaciones (11)–(12) y considerando el volumen constante:

$$\frac{dV_{ol}}{dt} = 0. \quad (19)$$

En la sección a continuación se establece la formulación matemática para el comportamiento de la concentración de bacterias, los correspondientes sustratos, la temperatura, y el nivel de pH, dentro de las reacciones. Se analizan todas las situaciones operativas, tanto cuando el reactor funciona en regiones de operación normales como cuando se encuentra en zonas de inhibición o por debajo de límites operacionales.

### 3.2.2 Dinámicas adicionales dentro del proceso

Hasta el momento se han tenido las consideraciones más básicas para el diseño de modelos para bioprocesos, tomando como referencia tres configuraciones de reactores. Sin embargo, se deben tener en cuenta otro

tipo de dinámicas como las reacciones bioquímicas y de crecimiento microbiológico. Cada una de estas dinámicas están relacionadas con la producción de sustratos que limitan la operación del reactor, así como la generación de metabolitos. Por esta razón, se presentan a continuación otras características que deben ser consideradas con el objetivo de lograr una descripción matemática más completa del proceso.

**Formación de un producto de síntesis** El desarrollo de microorganismos dentro de los reactores trae consigo la formación de productos que son solubles dentro de la misma mezcla, o que quizás, bajo diferentes condiciones de operación se convierten en productos en estado gaseoso. De esta forma, el balance de masa del producto de interés dentro del reactor puede formularse como:

$$\frac{dP}{dt} = \nu X - DP - Q, \quad (20)$$

siendo  $P$  el producto de interés dentro de la reacción en fase líquida,  $Q$  la tasa de flujo de salida de la masa del producto dentro del reactor que se convierte a estado gaseoso, y  $\nu$  la tasa específica de producción. El término  $\nu X$  representa la velocidad de formación del producto de interés. En otras palabras, este término representa cómo la producción es catalizada debido a la presencia de una concentración de biomasa  $X$ .

**Consideraciones en el crecimiento específico de bacterias** El parámetro  $\mu$  es un elemento de vital importancia a la hora de caracterizar el comportamiento de un grupo poblacional de bacterias en específico, en particular afecta la dinámica de la velocidad de crecimiento de la biomasa, el consumo de sustrato y la formación de producto. De acuerdo con experimentos recientes [48, 12], se pudo concluir que el parámetro  $\mu$  varía en el tiempo y es influenciado por los efectos físico-químicos y biológicos entre los cuales se tienen: la concentración de sustrato, concentración de biomasa, concentración de producto, pH, temperatura, concentración de oxígeno disuelto así como una variedad de inhibidores de crecimiento microbiano.

**Consideraciones en la concentración de los sustratos** La mayoría de los modelos analíticos de tasas de crecimiento específicas provienen del planteamiento de la ley de Monod [47] (ver Figura 11), que expresa la dependencia del parámetro  $\mu$  en la concentración de sustrato de la siguiente manera.

$$\mu = \frac{\mu_{max}^M S}{K_M + S} \quad (21)$$

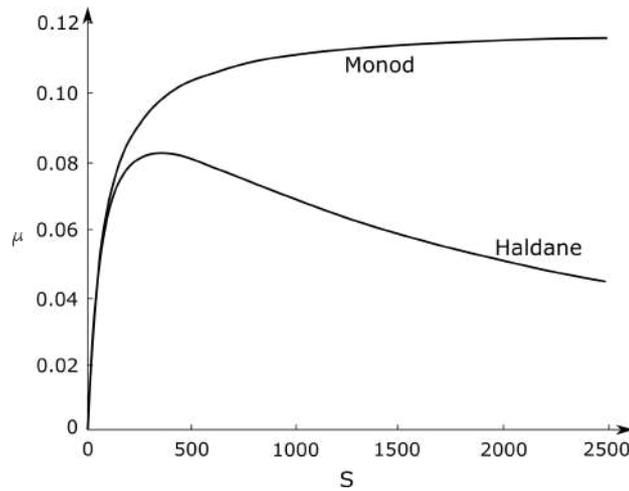
Donde  $\mu_{max}^M$  es la tasa máxima de crecimiento,  $S$  es la concentración de sustrato y  $K_M$  es la constante Michaelis-Menten. Lo que hizo Monod, en el año de 1942 [47], fue hacer la adaptación del modelo matemático al caso específico de crecimiento de microorganismos, pero sin ningún tipo de justificación física en específico. Sin embargo, con el fin de ajustar el modelo a los datos experimentales, el autor propuso la siguiente modificación:

$$\mu = \mu_{max} \left( 1 - \exp \left( \frac{-S}{K_M} \right) \right) \quad (22)$$

Lo curioso es que aunque esta última ecuación se ajustaba a los datos de su caso, el mismo autor aseguró, "Cualquier modelo matemático de curva sigmoideal podría ajustarse a los datos experimentales", razón por la cual optó por mantener la ecuación (21) como su propuesta principal para dar explicación al fenómeno.

Sin embargo, la formulación de Monod no considera los casos en donde existe inhibición por grandes concentraciones de sustrato. No obstante, como se observa en la Figura 33, el cambio de comportamiento debido al fenómeno de inhibición en la dinámica de crecimiento bacteriano es muy relevante.

En consecuencia, Andrews sugirió que el efecto de inhibición debería ser tratado con la ley de Haldane [49, 42], que en principio fue usada para describir la inhibición que se presentaba en las reacciones enzimáticas en sustratos.



**Figura 11:** Valor de  $\mu$  representado por los modelos Monod y Haldane [2].

$$\mu = \frac{\mu_{max}^H S}{K_M + S + \frac{S^2}{K_I}}, \quad (23)$$

en donde  $K_I$  es el parámetro de inhibición y el valor de  $\mu_{max}$  está dado por:

$$\mu_{max}^H = \mu_{max}^M \left( 1 + \sqrt{\frac{K_M}{K_I}} \right). \quad (24)$$

Si el efecto de inhibición de sustrato es eliminado, la ley de Haldane automáticamente se convierte en la ley de Monod.

**Consideraciones en la concentración de bacterias** A través de varios trabajos experimentales [50, 49], se ha observado que el crecimiento de la biomasa se ve condicionado por su concentración. Para ello, se muestra a continuación el modelo propuesto por Verhulst en el año de 1838 [17], el cual que explica este fenómeno en donde la tasa de crecimiento específica decrece linealmente con la concentración de biomasa.

$$\mu = \mu_{max}^M (1 - aX), \quad (25)$$

donde  $\mu_{max}^M$  y  $a$  son las tasas máximas de crecimiento y la constante de inhibición respectivamente. Otro modelo que se presenta en la literatura y que relaciona a las variables  $S$  y  $X$  es:

$$\mu = \left( \frac{\mu_{max}^M S}{K_C X + S} \right) \quad (26)$$

donde  $K_C$  y  $S$  son una constante del modelo y la concentración del sustrato respectivamente. Este modelo fue propuesto por Contois [51] en el año de 1959, en donde se hace énfasis en la dependencia de la variable  $\mu$  con respecto a la variable  $X$ .

**Incidencia de las variables pH y temperatura** El crecimiento de la biomasa dentro de un reactor ocurre únicamente cuando las variables temperatura y pH se sitúan dentro de rangos admisibles de operación. Específicamente, en procesos de digestión anaerobia, el proceso opera de manera correcta solamente si el valor de pH es cercano a un valor de 7. Para el caso de la temperatura, la influencia de esta variable es usualmente modelada a través de la ley de Arrhenius, que en principio fue propuesta por Topiwala y Sinclair [52]. Esta ley está se representaba con la siguiente ecuación.

$$\mu = a_1 \exp\left(\frac{-E_1}{RT}\right) - a_2 \exp\left(\frac{-E_2}{RT}\right) - b, \quad (27)$$

en donde  $E_1$ , y  $E_2$  son las energías de activación,  $R$  es la constante de gases, y  $a_1$ ,  $a_2$  y  $b$  son las constantes de ajuste a los datos experimentales. Esta expresión muestra que el crecimiento específico de bacterias se incrementa continuamente con el valor de la temperatura hasta un máximo de  $T_2$ , momento en el cual las células mueren. La anterior ecuación solo es válida para aquellos casos que cumplen que  $T_1 \leq T \leq T_2$  y también que  $T < T_1$  o  $T > T_2$ , donde  $T_1$  representa el valor mínimo que puede tomar la temperatura  $T$ .

### 3.2.3 Reacciones en el proceso

Un proceso biotecnológico es un conjunto de  $R$  reacciones que involucran a una cantidad de  $C$  componentes. Estos esquemas de reacciones no representan una reacción estequiométrica entre los componentes, en contraste con lo que normalmente ocurre en la práctica para reacciones químicas. Se podría decir que esta representa una relación cualitativa más que determinística; nos da noción de cuál es el comportamiento de los componentes

de la reacción. Una de las grandes ventajas de este tipo de planteamientos es que se hace posible unir la naturaleza de los fenómenos químicos, bioquímicos y de procesos de crecimiento microbiano en un único modelo.

Con el fin de ilustrar las reacciones implicadas en el proceso de producción de biogás, considere la variable  $\xi_i$  que representa el componente  $i$  de la reacción, que puede ser relativo a: la población de microorganismos, las enzimas, los sustratos que son ingresados al reactor, y los sustratos que son propios de la reacción. Una reacción puede escribirse con relación a sus componentes de la siguiente manera:



donde  $\xi_1$  y  $\xi_2$  son los reactantes que producen a  $\xi_3$  en una reacción que es irreversible. El parámetro  $\varphi$  representa la velocidad de reacción o velocidad de consumo de los reactantes. El caso anterior representa una situación particular, pero se puede generalizar para un número mayor de reacciones.

Finalmente, es de resaltar que el modelado de esquemas de procesos biotecnológicos es una herramienta que permite evaluar el desempeño del proceso ante cambios operacionales, lo que permite resolver problemas de ingeniería, como por ejemplo, aumentar la producción de metano en un reactor de digestión anaerobia o evitar que el sistema trabaje en regiones de operación no factibles. El modelado matemático de estos procesos, sin importar el grado de detalle, no explicará completamente todas las dinámicas de la reacción. Por este motivo, es el ingeniero de procesos quien selecciona el nivel de detalle del modelo del biorreactor que posibilita su implementación. En algunos casos, por ejemplo, los sustratos dentro del reactor que no limitan la reacción por lo general no son considerados dentro del modelo. De la misma manera, los subproductos de la reacción que no son sustratos y que no son de interés en el diseño o control, son omitidos. Así entonces, aunque el modelo seleccionado para describir un proceso en particular no contenga todas las dinámicas de las reacciones, este puede ser implementado como insumo de los sistemas de supervisión y control.

En las secciones a continuación se explican los términos que sobresalen de la ecuación general de reacciones homogéneas.

**Crecimiento específico de bacterias, flujo de salida y flujos de entrada al reactor** Para las reacciones biológicas de digestión anaerobia, la tasa de reacción  $\varphi$  está relacionada con el término crecimiento microbiano. El término  $\varphi$  representa la tasa de crecimiento de una biomasa en particular con concentración  $X_i$  y puede calcularse como:

$$\varphi_j = \mu_j X_i \quad (29)$$

donde  $\mu_j$  es el término de tasa de crecimiento específica. De manera general, cualquier sistema de especies y reacciones dentro de una mezcla homogénea dentro de un reactor puede describirse como:

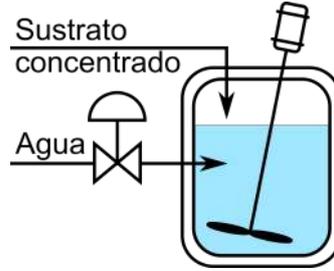
$$\frac{d\xi_i}{dt} = \sum_{j \sim i} (\pm) k_{ij} \varphi_j - D\xi_i - Q_i + F_i, \quad (30)$$

donde  $Q_i$  representa la tasa de masa removida en estado gaseoso para los componentes  $\xi_i$  que son solubles en la fase líquida, que es donde se generan y pasan a estado gaseoso a presión atmosférica. Sin embargo, si se omite el efecto de transferencia de fase líquido a gas, se puede asumir que el gas que se produce del proceso de digestión anaerobia es proporcional a la concentración en la fase líquida donde se produce, por lo tanto se tiene que:

$$Q_i = \beta_i \xi_i \quad (31)$$

donde  $\beta_i$  es el coeficiente de transferencia específico de líquido a gas y  $\beta_{is}$  es la concentración de saturación. En la ecuación (31) se debe cumplir que  $0 \leq \beta_i$  y  $0 \leq \xi_i \leq \xi_{is}$ . Del anterior planteamiento, se puede suponer que  $\xi_i = 0$  solo cuando el componente resultante de la reacción no puede ser llevado de fase líquida a gas. Adicionalmente, la variable  $F_i$  en (30) representa la tasa de alimentación al reactor para cada uno de los componentes  $\xi_i$  que son los sustratos que provienen de fuera de la reacción y son introducidos.

El modelado de la entrada al sistema depende de cómo el reactor es alimentado, de la composición del sustrato y del estado del material (líquido o gas). Existen dos vías por las cuales se introduce sustrato líquido al reactor. La primera de ellas es para los casos en el que el reactor es alimentado directamente con el sustrato concentrado, tal y como se muestra en la Figura 12. La segunda manera de hacerlo es la que se muestra en la Figura 13 en donde el sustrato es diluido en el flujo de entrada con agua.

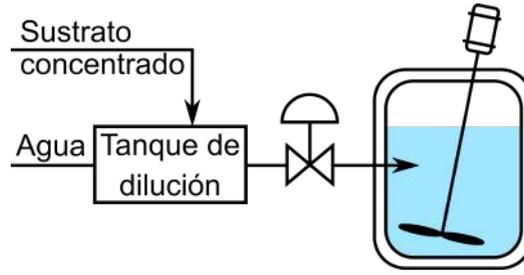


**Figura 12:** Sustrato que ingresa al reactor concentrado.

Para el caso de la Figura (12), no es necesario adicionar alguna variable al modelo, ya que el sustrato ingresa directamente al reactor, por lo que la variable sigue siendo  $F_i$ . Sin embargo, para el segundo caso, la tasa de alimentación es proporcional a la concentración en el flujo de entrada y se define como.

$$F_i = DS_{in,i}, \quad (32)$$

donde  $S_{in,i}$  denota la concentración del sustrato del flujo de entrada al reactor y  $D$  es el índice de dilución. De manera general, para todos los sustratos



**Figura 13:** Sustrato que ingresa al reactor luego de diluirlo con agua

en estado líquido que entran al reactor, se puede generalizar (32) mediante el siguiente vector que contiene los sustratos.

$$S_{in} = [S_{in,1}, S_{in,2}, \dots, S_{in,N}]^T \quad (33)$$

Se define entonces que  $S_{in,i} = 0$  para cuando  $\xi_i$  no corresponde con un sustrato externo, por lo tanto:

$$F = DS_{in} \quad (34)$$

Finalmente, incluyendo todas las consideraciones anteriores, un modelo más general se formula en (35).

$$\frac{d\xi}{dt} = K\varphi - D\xi + DS_{in} - Q \quad (35)$$

Aunque en este trabajo únicamente se consideran sustratos líquidos, se explica a continuación el modelado del ingreso al reactor de sustratos en fase gaseosa. Considerando la dinámica de transferencia dinámica de líquido a gas de la ley de Henry así como la tasa de transferencia de oxígeno, se tiene que:

$$O_{trf} = k_L a (C_S - C), \quad (36)$$

donde  $k_L a$  es el coeficiente de transferencia de masa,  $C_S$  es la concentración de saturación de oxígeno y  $C$  es el oxígeno disuelto en el reactor. Esta ecuación tiene muchos inconvenientes para ser propuesta en ambientes reales, debido a que los coeficientes  $C_S$  y  $k_L a$  pueden ser desconocidos y variantes en el tiempo. El valor de  $C_S$ , depende de variables como la presión parcial de oxígeno, la temperatura, la salinidad y de factores como la geometría del aireador o el flujo de aire que entra al reactor. Cabe resaltar que, dentro de los reactores, las tasas de flujo de oxígeno a la entrada y a la salida son medidas. Si se supone que  $\xi_n$  es un sustrato gaseoso, entonces, partiendo de la ecuación (36) se puede plantear que:

$$F_n = k_L a (F_g) (\xi_{ns} - \xi_n), \quad (37)$$

donde  $F_n$  es la tasa de alimentación del reactor en estado gaseoso,  $\xi_{ns}$  es la concentración de saturación y  $k_L a$  es el coeficiente de transferencia que depende del coeficiente de aireación  $F_g$ .

### Estructura general del modelo dinámico de digestión anaerobia

Considere el modelo dinámico general de digestión anaerobia descrito por:

$$\frac{d\xi}{dt} = K\varphi - D\xi - Q + F. \quad (38)$$

Para la anterior ecuación, se tiene que las dimensiones de las matrices son  $\dim(\xi) = \dim(F) = \dim(Q) = N$ . Y la dimensión de la matriz de coeficientes estequiométricos es  $\dim(K) = NxM$ . En este lugar se conoce el número de reacciones independientes que son consideradas dentro del reactor, por lo que se define a  $p = \text{rango}(K)$ .

Es muy interesante definir una posible partición que se pueda llevar a cabo en este tipo de reacciones. La utilidad se verá más adelante, sobre todo, en el uso que se le dará cuando el sistema sea separado entre las variables conocidas y desconocidas que están almacenadas en la matriz de parámetros estequiométricos  $K$ . Si tenemos en cuenta que  $p$  representa el número de reacciones independientes de la matriz  $K$ , entonces podemos plantear las siguientes definiciones. La matriz  $K_a$ , que proviene de la matriz  $K$ , tiene las dimensiones  $K_a = \text{rango}(pxM)$ . Por lo que la matriz  $K_b$  contiene la información restante de la matriz  $K$ . Para el caso del resto de elementos de la ecuación general (38);  $\xi$ ,  $Q$ , y  $F$ , las correspondientes matrices que resultan son  $\xi_a$  y  $\xi_b$ ,  $Q_a$  y  $Q_b$ , y  $F_a$  y  $F_b$ , que corresponden con las matrices de parámetros estequiométricos  $K_a$  y  $K_b$ . A continuación se muestra cómo queda el sistema dividido según como se han planteado las nuevas restricciones.

$$\frac{d\xi_a}{dt} = K_a\varphi - D\xi_a - Q_a + F_a \quad (39)$$

y

$$\frac{d\xi_b}{dt} = K_b\varphi - D\xi_b - Q_b + F_b \quad (40)$$

Finalmente se plantea la siguiente propiedad, en la que se propone una transformación lineal de tal manera que:

$$Z = A_0\xi_a + \xi_b \quad (41)$$

Donde la matriz  $A_0$  tiene dimensión  $(N-p)xp$ , y representa la única solución de la ecuación matricial:

$$A_0K_a + K_b = 0 \quad (42)$$

Por lo tanto, el sistema de ecuaciones (39) y (40) queda planteado de la siguiente manera.

$$\frac{d\xi_a}{dt} = K_a\varphi - D\xi_a - Q_a + F_a, \quad (43)$$

$$\frac{dZ}{dt} = -DZ + A_0(F_a - Q_a) + (F_b - Q_b) \quad (44)$$

Con el objetivo de demostrar el planteamiento del anterior sistema de ecuaciones, (43) y (44), se parte de que el sistema se divide en estados medidos  $\xi_a$  y en estados no medidos  $\xi_b$ , ver ecuaciones (39) y (40). Por lo que la ecuación (41) representa realmente una combinación lineal de  $\xi_a$  y  $\xi_b$ . El primer paso consiste entonces en derivar la ecuación (41) a ambos lados, por lo que se obtiene que:

$$\dot{Z} = A_0\dot{\xi}_a + \dot{\xi}_b \quad (45)$$

Si reemplazamos las ecuaciones (39) y (40) en la ecuación (45), tenemos el siguiente resultado.

$$\dot{Z} = A_0(K_a\varphi - D\xi_a - Q_a + F_a) + K_b\varphi - D\xi_b - Q_b + F_b \quad (46)$$

Al resolver los anteriores términos alojados en el paréntesis obtenemos:

$$\dot{Z} = A_0K_a\varphi - A_0D\xi_a - A_0Q_a + A_0F_a + K_b\varphi - D\xi_b - Q_b + F_b \quad (47)$$

Finalmente, realizamos una agrupación de términos que permitan plantear la ecuación de la siguiente forma (35):

$$\dot{Z} = -D(A_0\xi_a + \xi_b) + A_0(F_a - Q_a) + F_b - Q_b + A_0K_a\varphi + K_b\varphi \quad (48)$$

Ahora tomemos la ecuación (41) y la reemplazamos en la ecuación (48), por lo que resulta lo siguiente.

$$\dot{Z} = -DZ + A_0(F_a - Q_a) + F_b - Q_b + \underbrace{\varphi(A_0\xi_a + \xi_b)}_{\text{eliminar}} \quad (49)$$

Para cumplir con la condición que aparece en la ecuación (49), la única manera es definiendo los términos  $(A_0\xi_a + \xi_b) = 0$  o  $\varphi = 0$ . Por lo tanto se concluye que la condición debería ser.

$$(A_0\xi_a + \xi_b) = 0 \quad (50)$$

Tomando las ecuaciones (43) y (44), que son el resultado de esta demostración, cuando el término  $(F_a - Q_a)$  es idénticamente cero, la partición del sistema  $(\xi_a, \xi_b)$  es muy adecuada para nuestros propósitos debido a que la dinámica de  $Z$  es independiente de  $K$  y  $\varphi$ . Lo que nos dice la ecuación (44) es que esta dinámica es independiente de  $\varphi$ .

**Criterios de estabilidad bajo las consideraciones de modelado** Es muy importante analizar las dinámicas del sistema valores cercanos a los límites operacionales, dado que se ha demostrado mediante simulación [15], que en algunos casos cuando se maximiza el metano producido, las perturbaciones pueden llevar al sistema a puntos no factibles de operación, incluso, a fallos irreversibles. Con el fin de analizar la estabilidad del sistema, consideremos las siguientes suposiciones:

**Suposición 1:** La tasa de dilución tiene los siguientes límites operacionales:

$$0 < D_{min} \leq D(t), \quad (51)$$

donde  $D_{min}$  representa el menor valor de la tasa de dilución operativa y tiene que ser mayor que cero.

**Suposición 2:** Los sustratos que alimentan al reactor están limitados por:

$$0 < F_i(t) < F_{max} \quad (52)$$

Por lo que, para que este sustrato pueda existir dentro del reactor, este tiene que ser mayor que cero y menor a una tasa de flujo máxima  $F_{max}$ .

**Suposición 3:** Cada reacción involucra por lo menos un reactante, de tal manera que no sea un catalizador ni un autocatalizador.

De acuerdo con las tres suposiciones anteriores, se propone el siguiente Teorema:

**Teorema 1:** Las variables de estado del modelo general de la ecuación (39) siempre serán positivas y operarán dentro de los límites operacionales para todo tiempo  $t$ .

Para probar el anterior teorema, en principio, se debe probar que todos los estados son positivos, es decir:

$$\xi_i(t) \geq 0. \quad (53)$$

Lo anterior cumple para todo tiempo  $t$  y sustrato  $i$  que ingrese al reactor. Supongamos en principio que  $\xi_i(t) = 0$  para algún sustrato  $i$ . Si tomamos el planteamiento del modelo general teniendo en cuenta los gases generados dentro de la reacción, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{d\xi}{dt} = K\varphi - D\xi + F - B\xi. \quad (54)$$

$B$  es una matriz que se define como sigue para todas las especies  $i$  que se encuentran dentro del reactor:

$$B = diag\beta_i \quad (55)$$

donde  $\beta_i$  es el coeficiente específico de tasa de transferencia líquido a gas (por lo que si  $\beta_i = 0$  el componente  $\xi_i$  se supone no es gasificable). Por lo tanto, teniendo en cuenta a (54), la dinámica del sistema se reduce a.

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \sum_j k_{ij}\varphi_j + F_i \geq 0. \quad (56)$$

Note que, para el término del sumatorio, solo se tienen en cuenta las reacciones con el subíndice  $j$  que involucran a  $\xi_i$  como un producto pero no como un sustrato y tampoco como un autocatalizador. Por lo que el término

$k_{ij}\varphi_j + F_i$  es no negativo, y por lo tanto,  $\xi_i(t) \geq 0$  para cualquier tiempo  $t$ .

Finalmente, para concluir con la prueba del Teorema 1, se prueba que las variables de estado tienen límites superiores, lo cual restringe la programación de los sistemas para propósitos de control. En principio, se seleccionan los reactantes del proceso, que son  $\xi_n$  necesariamente, ya que de acuerdo con la Suposición 3 no son ni catalizadores y autocatalizadores. Para llevar a cabo la demostración se definirán dos conjuntos de índices,  $J = (m_1, m_2, \dots, m_p)$  e  $I = (n_1, n_2, \dots, n_q)$ .  $m_i$ , con  $i = 1, \dots, p$ , son los índices de la reacción que definen a  $\xi_n$  como un reactante y no como un producto. Por su parte,  $n_i$ , con  $i = 1, \dots, q$ , son los índices de los componentes, sin incluir a  $\xi_n$ , que se encuentran relacionados con la reacción. Adicionalmente, se define entonces una variable auxiliar  $z_n$  de tal manera que:

$$z_n = a_n \xi_n + \sum_{i \in I} \xi_i, \quad (57)$$

con

$$a_n = \max_{j \in J} \frac{\sum_{i \in I} k_{ij}}{-k_{nj}} \geq 0, \quad (58)$$

donde la variable  $k_{ij}$  representa cada uno de los parámetros estequiométricos que componen a la matriz  $K$ . Por lo tanto, la dinámica de  $z_n$  se representa tal como se muestra a continuación.

$$\frac{dz_n}{dt} = \sum_{j \in J} \left( a_n k_{nj} + \sum_{i \in I} k_{ij} \right) \varphi_j - D z_n - a_n \beta_n \xi_n - \sum_{i \in I} \beta_i \xi_i + a_n F_n + \sum_{i \in I} F_i. \quad (59)$$

Partiendo de la Suposición 2 y de la definición de la ecuación (58) se tiene que:

$$\frac{dz_n}{dt} \leq -D z_n + (a_n + q) F_{max} \quad (60)$$

En este punto existen dos posibilidades dependiendo del valor inicial de  $z_n$  que sea seleccionado. La primera de las posibilidades es que:

$$z_n(0) > \frac{(a_n + q) F_{max}}{D_{min}}. \quad (61)$$

De acuerdo con lo anterior, es claro que, de acuerdo con la Suposición 2 y la ecuación (60), la derivada en el tiempo de  $z_n(0)$  tiene valor negativo, y por lo tanto,  $z_n(t) \leq z_n(0)$  para todo tiempo  $t$ . Por otro lado, la segunda posibilidad se presenta cuando se cumple qué:

$$z_n(0) < \frac{(a_n + q) F_{max}}{D_{min}}. \quad (62)$$

Por lo tanto, de acuerdo con la ecuación (60) se tiene que  $z_n$  posee los límites demarcados de la siguiente manera.

$$z_n(t) \leq \frac{(a_n + q)F_{max}}{D_{min}}. \quad (63)$$

Una expresión explícita del límite superior de las variables de estado es formulada introduciendo la siguiente suposición en las condiciones iniciales.

**Suposición 4:** Los valores iniciales de las variables de estado  $\xi_i(t)$  tienen límites superiores tal como se muestra a continuación.

$$a_n \xi_n(0) + \sum_{i \in I} \xi_i(0) \leq \frac{(a_n + q)F_{max}}{D_{min}} \quad (64)$$

Por lo tanto, se define el siguiente teorema.

**Teorema 2:** Teniendo en cuenta las suposiciones 1 a 4, las variables de estado del sistema  $\xi_i(t)$  del modelo son no negativas y limitadas para todo  $t$  tal como se muestra a continuación:

$$0 \leq \xi_i(t) \leq \max \left\{ 1, \frac{1}{a_n} \right\} (a_n + q) \frac{F_{max}}{D_{min}}. \quad (65)$$

Considerando que:

$$F = DS_{in} = D(S_{in,1}, S_{in,2}, \dots, S_{in,N})^T, \quad (66)$$

las suposiciones 1, 2, y 4 son reemplazadas por las siguientes:

**Suposición 1\*:** Se tiene que, para todo tiempo  $t$ .

$$D(t) \geq 0 \quad (67)$$

**Suposición 2\*:** Se tiene que, para todo tiempo  $t$ .

$$0 \leq S_{in,i}(t) \leq S_{max} \quad (68)$$

**Suposición 4\*:** Se tiene que:

$$a_n \xi_n(0) + \sum_{i \in I} \xi_i(0) \leq (a_n + q)S_{max} \quad (69)$$

De acuerdo con las anteriores suposiciones, y teniendo en cuenta la Suposición 3, las variables de estado  $\xi_i(t)$  del modelo dinámico general son positivas y delimitadas para todo tiempo  $t$  como se muestra a continuación:

$$0 \leq \xi_i(t) \leq \max \left\{ 1, \frac{1}{a_n} \right\} (a_n + q)S_{max} \quad (70)$$

### Equilibrio de las dinámicas del modelo

Se dice que un sistema está en equilibrio cuando el valor de sus estados permanece constante. Con el objetivo introducir el concepto de equilibrio en el bioproceso, considere que los estados del sistema están dados por:

$$\frac{d\xi}{dt} = K\varphi - D\xi + F - Q. \quad (71)$$

Por lo tanto, el sistema se encontrará en estado estacionario o en equilibrio cuando:

$$\frac{d\bar{\xi}}{dt} = 0, \quad (72)$$

entonces:

$$K\varphi - \bar{D}\bar{\xi} + \bar{F} - Q = 0. \quad (73)$$

Para mantener el sistema en este estado, las variables  $D$ , que es el grado de libertad para el diseño de controladores, y la variable  $F$ , que representa el flujo de ingreso de sustratos, tienen que permanecer constantes justo cuando el sistema se encuentra operando en ese punto. Por lo tanto, estas variables se denotan como  $\bar{D}$  y  $\bar{F}$  respectivamente. Hay que tener presente que este tipo de reacciones tienen múltiples puntos de equilibrio, esto se debe a la acción autocatalítica de los microorganismos. A continuación se muestran los tipos de equilibrios que pueden presentarse.

- **Equilibrio de los estados por lavado del reactor:** para este caso, las variables se comportan de la siguiente manera;  $\bar{X} = 0$ ,  $\bar{E} = 0$ ,  $\bar{P} = 0$ , y  $\bar{S} = \bar{S}_{in}(0)$ . El término lavado del reactor corresponde con el momento en el que el sistema queda sin bacterias. Esto puede ocurrir para cualquier valor de  $\bar{D}$  y de  $\bar{S}_{in}$ . Este es, por supuesto, un estado de operación indeseado porque se tendría que reiniciar el proceso, lo que implica un alto coste operacional.
- **Equilibrio operacional de los estados:** en este caso, la operación de los estados del sistema se igualan a cero como se muestra en la ecuación (72). Esto permite encontrar, para cada uno de los estados, el punto en el que estas variables se han estabilizado en el sistema y su valor no cambia en el tiempo. Para poder encontrar estos puntos de equilibrio analíticamente, se necesita tener todas las dinámicas del proceso caracterizadas. Pero, como se observará más adelante, esto no es siempre posible debido a que las buenas aproximaciones al proceso real implican modelos de ecuaciones algebraicas no lineales [5]

### 3.3 Modelo matemático en reactores anaerobios

Debido al interés de diseñar y operar sistemas eficientes de digestión anaerobia, desde hace ya varias décadas el modelado matemático ha ocupado gran atención por parte de la comunidad científica. Para estos sistemas de reacción homogénea, el modelado matemático es aún más complejo debido

a que el proceso de producción de biogás se lleva a cabo en múltiples etapas. En cada una de ellas conviven diferentes tipos de bacterias que operan en condiciones específicas. Es por esta razón que estos sistemas fácilmente llegan a regiones de inestabilidad. Esta inestabilidad se evidencia usualmente en la caída de la producción de metano, la caída del valor del pH, el aumento de los ácidos volátiles grasos, causando fallas en el proceso que llevan el sistema a puntos de operación no factibles. Las causas que generan este efecto son variables, entre ellas se encuentran la sobre carga de sustratos a la entrada así como la caída abrupta de los mismos, entrada de inhibidores o un inadecuado control de temperatura [53]. Las soluciones que usualmente se usan a nivel industrial son la adición de bases para el control del pH y el restablecimiento de la capacidad de producción de metano. Otra alternativa es aumentar el tiempo de retención hidráulico para aumentar la cantidad de sustratos dentro del reactor. Cuando todo lo anterior falla, la última opción consiste en reemplazar el contenido del reactor con lodos sanos. Con el objetivo de diseñar y operar los sistemas de digestión anaerobia de manera eficiente, se deben formular modelos matemáticos apropiados que permitan la implementación de sistemas de monitoreo y control.

De acuerdo a lo expuesto anteriormente, en las siguientes cuatro secciones se explicarán las consideraciones que fueron tenidas en cuenta para proponer la construcción del modelo matemático. Luego, en la siguiente sección se muestran las modificaciones al modelo AM2 que fueron tenidas en cuenta para añadirlas en la propuesta final del modelo. La última sección contiene la propuesta final del modelo que será usado en este trabajo de tesis.

### 3.3.1 Modelado de las cinéticas de bacterias

Desde la comprensión inicial de los procesos fermentativos, han sido propuestas múltiples ecuaciones que describen el crecimiento de las bacterias. El planteamiento que en principio fue usado para dar explicación a este fenómeno fue el modelo exponencial [54]. Esta hipótesis se basó en el hecho de que la velocidad de crecimiento en un instante es proporcional a la concentración de células presentes en un momento determinado, es decir:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X, \quad (74)$$

donde  $\mu$  y  $X$  representan las constantes de proporcionalidad llamadas tasas de crecimiento y concentración de células respectivamente. Sin embargo, este modelo no se ajusta al comportamiento natural de estos sistemas debido a que la tasa de crecimiento  $\mu$  no es constante en el tiempo.

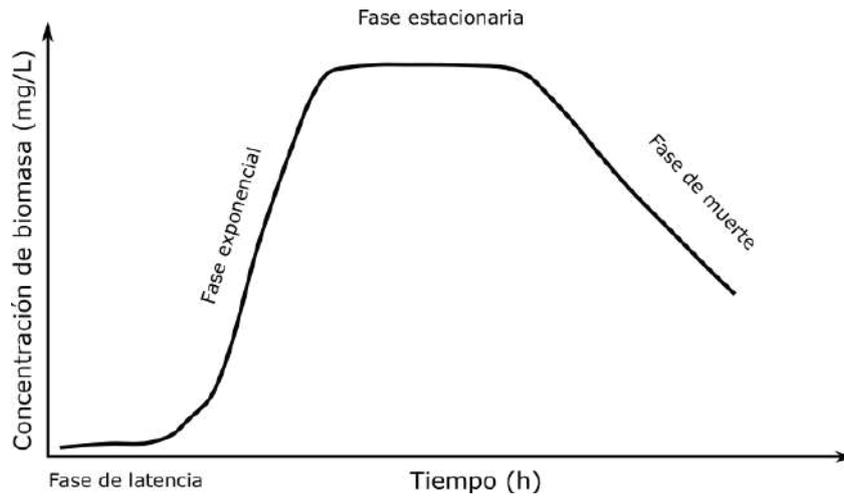
El ciclo de vida de las bacterias se puede describir en cuatro fases: la fase de latencia, la fase exponencial, la fase estacionaria y la fase de muerte (ver Figura 14). En la fase de latencia, las bacterias se toman un tiempo determinado para adaptarse a su nuevo ambiente (dinámica de consumo de sustratos y condiciones de operación) dentro del biorreactor. Prácticamente, durante esta fase no existe crecimiento de bacterias. Sin embargo, cuando esta fase termina, el crecimiento de bacterias es muy acelerado en la fase

exponencial. En la siguiente fase, se identifica cuando no existe un crecimiento de bacterias y se llega a un valle. Este es el momento en el que se llega a un equilibrio, de tal manera que, el número de bacterias que crecen es muy cercano al número de bacterias que mueren. El sistema tiene que estar lo suficientemente estable para que permanezca en esta zona. En este punto se consume una cantidad de nutrientes de tal manera que favorecen el crecimiento de bacterias, mientras que los compuestos tóxicos a su vez llevan a la muerte al mismo grupo de células. La última fase es la de muerte, en donde los nutrientes que se necesitan para llevar a cabo el proceso de crecimiento celular se han agotado por completo [3].

La dinámica del crecimiento de las bacterias mostrado en la Figura 14 se determina mediante la siguiente ecuación:

$$\mu = \frac{\ln\left(\frac{X_2}{X_1}\right)}{(t_2 - t_1)}, \quad (75)$$

donde  $X_1$  es la concentración de bacterias en el tiempo  $t_1$  y  $X_2$  es la concentración de bacterias en el tiempo  $t_2$ .



**Figura 14:** Curva de crecimiento de bacterias [3].

Existen dos tipos de cinéticas de crecimiento usadas para describir las tasas de crecimiento; modelos cinéticos estructurados y modelos cinéticos desestructurados cuyas características, ventajas y desventajas son presentadas en la Tabla 5.

Por lo tanto, para lograr un mejor ajuste, basado en el modelo de crecimiento de microorganismos de Monod [5], el comportamiento del crecimiento de estas células se describió como una función del sustrato, tal y como se muestra a continuación:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S}, \quad (76)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $K_s$  y  $S$  son la tasa de crecimiento específica, la tasa máxima de crecimiento específica, el coeficiente de velocidad media y la concen-

tración del componente en estudio. El modelo de Monod propone la existencia de una máxima tasa de crecimiento celular y una constante de saturación que son características de las bacterias bajo ciertas condiciones.

Este modelo representa muy bien el fenómeno bajo ciertas condiciones de operación, sin embargo, la dificultad de poder realizar mediciones en estos procesos, la diversidad de diseños de reactores para operar estos sistemas y la naturaleza cambiante de los sustratos que ingresan al reactor, ha llevado a desarrollar otras alternativas para lograr mejores ajustes a los datos.

Con respecto al modelo propuesto por Monod, se encontró que no era capaz de representar la velocidad de crecimiento bacteriano en presencia de sustratos tóxicos [49]. Algunos ejemplos de estos sustratos tóxicos son el cadmio, fenoles, etanol, ácidos volátiles, nitratos, y amonio. Los modelos de crecimiento cinético son muy útiles porque cumplen con la función de asistir a los ingenieros en el diseño de sistemas de control [55]. La literatura cuenta con dos tipos de modelos desestructurados; los que dan explicación al efecto de la inhibición del sustrato y los que no. La Tabla 6 muestra la lista de los modelos cinéticos considerados, los cuales son detallados a continuación.

**Tabla 5:** Tipos de modelos cinéticos; estructurados y desestructurados.

Tipos	Modelos cinéticos	
	Estructurados	Desestructurados
Características	Incorporan atributos genéticos, morfológicos, o bioquímicos que colectivamente determinan la fisiológico de la biomasa	Consideran a las bacterias como a organismos independientes que interactúan con el ambiente
Ventajas	Describen específicamente la tasa de crecimiento de las bacterias. Adecuados para ser valorados en transitorios	Son más adecuados para ser valorados en estado estacionario. Se ajustan mejor al modelado matemático
Desventajas	Son complicados y requiere una gran cantidad de ecuaciones para resolver	

### Modelo Monod

Este modelo fue introducido por Jacques Monod en el año 1942 con el propósito de describir la relación entre el crecimiento en específico de la población de bacterias y la velocidad de consumo de sustrato. El modelo puede ser definido con base en la medición de la concentración de sustrato en la biomasa. Los dos modelos propuestos se muestran a continuación.

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \quad (77)$$

y

$$\mu = \mu_{max} \frac{XS}{K_s + S}, \quad (78)$$

donde,  $\mu_{max}$ ,  $S$ ,  $K_s$ ,  $\mu$  y  $X$  son el promedio de crecimiento máximo de bacterias, la concentración de sustrato, la constante media de saturación, el promedio específico de crecimiento del correspondiente grupo de bacterias y la concentración de biomasa respectivamente. Considerando que este modelo asume que solo existe un sustrato que limita la dinámica de crecimiento celular, es muy importante resaltar que existen cinco grandes limitaciones:

- A concentraciones altas de sustrato, el coeficiente de crecimiento específico máximo es independiente de la concentración de sustrato.
- A concentraciones bajas de sustrato, el crecimiento es dependiente de la concentración de sustrato.
- El modelo de Monod no puede ser aplicado cuando el sustrato exhibe inhibición. En este caso, las bacterias limitan el crecimiento y el consumo de sustrato.
- El modelo de Monod no explica el consumo de sustrato que ocurre cuando las bacterias se encuentran en la fase de muerte, las cuales requieren de un mantenimiento para permanecer allí.
- El modelo no explica el crecimiento de bacterias para las fases de latencia y muerte.

A pesar de las limitaciones reportadas en la literatura, este modelo ofrece un muy buen ajuste a los datos experimentales, lo cual ha sido probado en una gran cantidad de trabajos científicos [56, 57, 58].

### Modelo Blackman

Este modelo fue introducido en 1905 y tiene una estructura muy similar al modelo propuesto por Monod, esto es, a bajas concentraciones de sustrato, el crecimiento es dependiente del sustrato, y a altas concentraciones el crecimiento es independiente de la concentración del sustrato. Este modelo se define de la siguiente manera:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s}, \quad (79)$$

donde  $\mu_{max}$ ,  $S$  y  $K_s$  son la tasa máxima de crecimiento específico, la concentración de sustrato y la constante de saturación media respectivamente. De igual manera, este modelo no es capaz de describir las fases de latencia y muerte. Este modelo no es muy comúnmente usado debido a que el ajuste a los datos experimentales no es muy bueno [59].

Ecuación	Modelo
Monod	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S}$
Blackman	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s}$
Haldane	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_i}}$
Tesseir	$\mu = \mu_{max} \left(1 - e^{-K_i S}\right)$
Moser	$\mu = \mu_{max} \frac{S^n}{K_s X + S^n}$
Contois	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s X + S}$
Logarítmica	$\mu = a + b \ln s$
Aliba-Edwards	$\mu = \mu_{max} \left(\frac{S}{K_s + S}\right)^{\frac{-S}{K_i}}$
Han & Levenspiel	$\mu = \mu_{max} \left(1 - \frac{S}{S_m}\right)^n \left(\frac{S}{S + K_s \left(1 - \frac{S}{S_m}\right)^m}\right)$
Powell	$\mu = \frac{(\mu_{max} + m)S}{K_s + S} - m$
Verhulst	$\mu = \mu_{max} \left(1 - \frac{X}{X_m}\right)$
Luong	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \left(1 - \frac{S}{S_m}\right)^n$
Webb	$\mu = \mu_{max} \frac{S \left(1 + \frac{S}{K_i}\right)}{S + K_s + \frac{S^2}{K_i}}$
Yano & Koga	$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_1} + \frac{S^3}{K_2}}$

**Tabla 6:** Modelos cinéticos mas importantes encontrados en la literatura.

### Modelo Haldane

El modelo de Haldane fue introducido en el año de 1930. En la comunidad científica es visto como una extensión de las consideraciones propuestas por el modelo de Monod, pero con la inclusión de una tercera variable que representa el momento en el cual las bacterias se encuentran en estado de inhibición, hecho muy oportuno debido a que esta situación es frecuente para cierto tipo de sustratos. Este modelo plantea que, ante altas concentraciones de sustrato, el crecimiento celular es inhibido debido a la presencia de sustratos tóxicos. Esto permite explicar el crecimiento de bacterias ante compuesto tóxicos y no tóxicos, lo cual representa un avance significativo. El planteamiento de la ecuación se muestra a continuación.

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_i}}, \quad (80)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $K_s$ ,  $S$  y  $K_i$  son respectivamente la velocidad de crecimiento específica, la máxima velocidad de crecimiento específica, la constante de saturación media, la concentración de sustrato y la constante de inhibición. Una gran ventaja de este modelo es que es capaz de describir todas las fases del crecimiento celular, lo que hace que sea ampliamente usado en la literatura [60].

### Modelo Tesseir

Este modelo fue propuesto en el año de 1942 y se caracteriza por tener una tendencia exponencial, de tal manera que el crecimiento celular es también proporcional a la concentración de sustrato. Debido a la simplicidad del modelo, este no es capaz de explicar el momento en el que las bacterias se encuentran en estado de inhibición, por lo tanto, no es capaz de explicar las fases de latencia y muerte. Este modelo se define como:

$$\mu = \mu_{max} (1 - e^{K_i S}), \quad (81)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $K_i$  y  $S$  son la tasa de crecimiento específica, la tasa máxima de crecimiento específica, la constante de proporcionalidad y la concentración de sustrato respectivamente.

### Modelo Moser

Este es un modelo desestructurado basado en la concentración del sustrato. Aquí, se introdujo el parámetro constante  $n$  al modelo de Monod, el cual permite llevar a cabo una buena parametrización a los datos experimentales. Por esta razón, en algunas ocasiones se presenta como la evolución del modelo de Monod. El modelo Moser se muestra a continuación:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S^n}{K_s + S^n}, \quad (82)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $S$ ,  $K_s$  y  $n$  son la tasa específica de crecimiento, la tasa máxima específica de crecimiento, la concentración de sustrato, la constante de saturación media, y el parámetro ajustable respectivamente. Este modelo no considera el comportamiento de las bacterias bajo el efecto de inhibición. La literatura ha demostrado que este modelo tiene un muy buen ajuste debido al grado de libertad adicional [61].

### Modelo Contois

Este modelo fue introducido en el año de 1959 y es una extensión del modelo de Monod. Su planteamiento es combinado, se basa en la información de las concentraciones de sustrato y biomasa dentro del reactor. Dicho modelo se escribe como.

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s X + S}, \quad (83)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $S$ ,  $K_s$  y  $X$  son la tasa específica de crecimiento, la tasa máxima específica de crecimiento, la concentración de sustrato, la constante de saturación media y la concentración de biomasa respectivamente. En este modelo se asume que la concentración de biomasa es inversamente proporcional a la tasa de crecimiento específica. Este modelo no captura el efecto de inhibición [51].

### Modelo Logarítmico

Este modelo fue introducido en el año de 1982 y describe la tasa de crecimiento como una función logarítmica de la concentración del sustrato. En cuanto a su desempeño, no es la mejor alternativa debido a que no es capaz de representar las fases de latencia, estado estacionario y muerte. El modelo logarítmico se escribe como.

$$\mu = a + b \ln s, \quad (84)$$

donde  $a$  y  $b$  son constantes y la variable  $s$  representa la concentración de sustrato.

### Modelo Aliba-Edwards

Este modelo es una extensión del modelo de Monod que considera el efecto de las inhibiciones. Introduce la variable constante inhibitoria y una relación exponencial entre la concentración del sustrato y la constante inhibitoria. Esta alternativa es capaz de describir las fases de latencia y muerte celular. El modelo Aliba-Edwards está descrito por la siguiente ecuación:

$$\mu = \mu_{max} \left( \frac{S}{K_s + S} \right) \exp \frac{-S}{K_I}, \quad (85)$$

donde  $\mu_{max}$ ,  $\mu$ ,  $S$ ,  $K_s$  y  $K_I$  son la tasa de crecimiento específica máxima, la tasa de crecimiento específica, la concentración de sustrato, la constante de saturación media y la constante de inhibición respectivamente. Aunque este modelo tiene problemas para explicar el momento en que el sistema se encuentra en fase de inhibición, es ampliamente usado por la comunidad científica para realizar trabajos de simulación [60].

### Modelo Han & Levenspiel

Este modelo fue introducido en el año de 1988 como una extensión al modelo de Monod. La extensión trajo consigo los efectos de inhibición debido a la presencia de sustrato, células y otra clase de productos. Este modelo tiene como novedad que establece un umbral de concentración de inhibición, donde los casos reaccionantes o la tasa de crecimiento reducen sus velocidades si se alcanza este punto. La ecuación se define como:

$$\mu = \mu_{max} \left( 1 - \frac{S}{S_m} \right)^n \left( \frac{S}{S + K_s \left( 1 - \frac{S}{S_m} \right)^m} \right), \quad (86)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $S$ ,  $S_m$  y  $K_s$  son la tasa de crecimiento específico, la tasa de crecimiento específico máxima, la concentración de sustrato, la concentración crítica del elemento inhibitor, y la constante saturación media respectivamente. Las variables  $m$  y  $n$  son constantes de ajuste del modelo a los datos experimentales. De acuerdo con la información encontrada en la literatura, la adición de la variable  $S_m$  le permite al modelo predecir el crecimiento de las especies en ambientes de sustratos tóxicos y no-tóxicos [8].

### Modelo Powell

Este modelo fue introducido en el año de 1967 y se basa en el modelo original de Monod. Este modelo introduce el parámetro  $m$  el cual representa un parámetro de mantenimiento. Este modelo no considera la inhibición causada por la presencia de sustratos tóxicos, por lo que las fases de latencia y muerte celular queda a merced de una difícil explicación. Este modelo se define de la siguiente manera.

$$\mu = \frac{(\mu_{max} + m)S}{K_s + S} - m, \quad (87)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $m$ ,  $K_s$  y  $S$  representan la tasa de crecimiento específico, la tasa de crecimiento específica máxima, un parámetro fijo de mantenimiento, la constante de saturación media y la concentración de sustrato respectivamente. Este modelo no es muy usado en la literatura, mostrando para algunos datos experimentales un ajuste no tan preciso [62]. Uno de los aspectos negativos de este modelo es que no es capaz de describir la tasa de crecimiento en presencia del efecto de inhibición por sustratos.

### Modelo Verhulst

Este modelo, que también es llamado el modelo logístico, fue introducido en el año de 1838. Se basa en la suposición de que el promedio de crecimiento de un microorganismo es proporcional al tamaño de la población y a los recursos no utilizados en un ambiente cerrado. La cinética es descrita basada únicamente por la concentración de la biomasa como:

$$\mu = \mu_{max} \left( 1 - \frac{X}{X_m} \right), \quad (88)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $X$ , y  $X_m$ , son la velocidad de crecimiento específica, la velocidad de crecimiento específica máxima, la concentración de biomasa y la máxima concentración de biomasa respectivamente. Algunos autores usan este modelo para predecir la velocidad de crecimiento específica [63].

### Modelo Luong

Este modelo fue introducido en el año de 1987. Describe el valor promedio de la cinética de crecimiento basado únicamente en la concentración del sustrato. Este modelo es una generalización del modelo de Monod donde término que se encuentra dentro del paréntesis en la ecuación (89) describe completamente la inhibición cuando se sobrepasa la concentración crítica del sustrato. El modelo de Luong se describe como:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \left( 1 - \frac{S}{S_m} \right)^n, \quad (89)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $K_s$ ,  $S$ ,  $S_m$  y  $n$  son la tasa de crecimiento específica, la tasa máxima de crecimiento específica, la constante de saturación media, la concentración de sustrato, la concentración crítica de inhibición y la constante de ajuste a los datos experimentales respectivamente. Este modelo

describe satisfactoriamente la dinámica de la biomasa en presencia de sustratos tóxicos y no tóxicos. El término  $n$  le permite tener un muy buen ajuste a los datos experimentales.

### Modelo Webb

Este modelo, propuesto en el año de 1963, describe la cinética de crecimiento basado únicamente en la concentración del sustrato. Este modelo proviene de una modificación del modelo de Haldane. La diferencia entre estos dos modelos es el término que se encuentra dentro del paréntesis en el numerador. El modelo de Webb se escribe como:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S \left(1 + \frac{S}{K_i}\right)}{S + K_s + \frac{S^2}{K_i}}, \quad (90)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $S$ ,  $K_i$  y  $K_s$  son la tasa de crecimiento específica, la tasa máxima de crecimiento específica, la concentración de sustrato, la constante de inhibición y la constante de saturación de velocidad media respectivamente. Este modelo representa muy bien el ajuste a los datos experimentales para los casos de sustratos tóxicos y no tóxicos. En el trabajo hecho por Mohanty et al. [64] se reporta que no es posible obtener un buen ajuste a los datos experimentales. Sin embargo, el modelo Haldane sí reporta muy buenos resultados para este mismo caso. En el trabajo reportado por S. Dey et al. [58], y como conclusión general, este modelo no mejora los resultados comparados con el modelo de Haldane.

### Modelo Yano & Koga

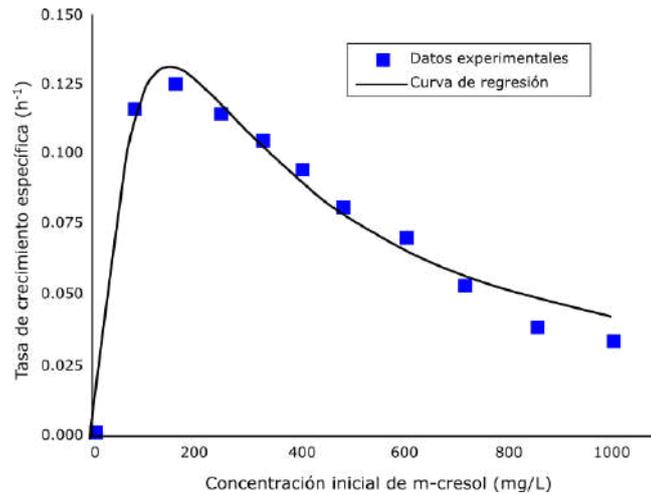
Este modelo fue introducido en el año de 1969. Entre las características más relevantes se encuentra que esta alternativa permite describir los efectos de la inhibición del sustrato. El modelo se define como se muestra a continuación:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_1} + \frac{S^3}{K_2^2}}, \quad (91)$$

donde  $\mu$ ,  $\mu_{max}$ ,  $S$ , y  $K_s$  son la tasa de crecimiento específica, la tasa máxima de crecimiento específica, la concentración de sustrato, y la constante de saturación media respectivamente.  $K_1$  y  $K_2$  son las variables de ajuste que describen el comportamiento de inhibición en el reactor.

Todos los modelos de tasas de crecimiento mostrados anteriormente han sido los esfuerzos, que, desde el área de investigación, se han llevado a cabo para explicar el fenómeno de digestión anaerobia para diferentes tipos de sustratos y reactores. La anterior revisión de la bibliografía centra los esfuerzos en determinar cuál es la mejor alternativa de modelado para usarlo en el trabajo de tesis de acuerdo con el sustrato utilizado.

Finalmente, el modelo de Haldane (ver (80)), es la mejor opción para caracterizar el comportamiento de bacterias bajo las condiciones de sustratos



**Figura 15:** Tasa de crecimiento específico según Haldane.

tóxicos y no tóxicos, que hacen que el sistema entre en regiones de inhibición de crecimiento de bacterias. En otras palabras, esta alternativa permite explicar por qué se presenta el lavado de la biomasa debido a la acumulación de ácidos (que en este caso es el mismo componente del sustrato de estudio). Este modelo tiene un comportamiento que se describe en la Figura 15. De acuerdo con este planteamiento, la tasa de crecimiento específico  $\mu$  alcanza su máximo valor  $\mu_{max}$  en un momento determinado, sin embargo, si el valor de la concentración del componente se incrementa más allá de este límite, este se comporta como inhibidor, provocando una reducción progresiva de este valor.

A partir del desarrollo de este modelo, los esfuerzos se centraron en dar explicación al resto de consideraciones que ocurren en el proceso de digestión anaerobia. Por esta razón, seis años más tarde, en el año de 1974, se introdujo por primera vez un modelo simple que consideró tan solo a una población de bacterias. Esto permitió relacionar los esfuerzos de encontrar las dinámicas de crecimiento de bacterias con las poblaciones de bacterias consideradas dentro del reactor. Más adelante, en el año de 1977, se introdujo un modelo que mejoró los resultados de simulación debido a que consideró tres etapas dentro de este tipo de reacciones: la solubilización de orgánicos, la etapa de acidogénesis y la etapa de metanogénesis. De acuerdo con los autores, el modelo planteó mejoras respecto a sus antecesores, debido a que se consideraron inhibiciones que ocurrían debido a la alta concentración de ácidos y amonio. Este modelo se enfocó en dar explicación al efecto de producción de biogás, en describir el fenómeno de equilibrio que ocurría con el carbonato y en considerar los balances de nitrógeno. En el año de 1983, Mosey et al. [43] introdujo un modelo que incluyó a cuatro grupos poblacionales (para dos reacciones de acidogénesis y dos reacciones de metanización) haciendo énfasis en la reacción que permite generar hidrógeno. Para los siguientes años, estudios llevados a cabo por otros autores generaron otros aportes que permitieron dar explicación a

otros detalles. Estos años de trabajo resultaron en modelos que consideraban a diferentes grupos poblacionales y sus respectivos sustratos, además de parámetros que funcionan como grados de libertad que permiten ajustar el modelo a los datos experimentales [65, 40, 66, 41]. Sin embargo, esto trajo como resultado que los modelos aumentaran en el número de parámetros, que debía ser medidos o estimados, lo que impedía su implementación en sistemas de supervisión y control.

Adicionalmente a las anteriores dificultades expuestas, los procesos de identificación y validación no son lo suficientemente robustos y no consideran la operación de estos sistemas en un rango amplio de posibilidades. Sin embargo, la dificultad de tener un modelo con ausencia de conocimiento de base fenomenológica, con un proceso complejo, y de naturaleza no lineal, además de tener la restricción de no disponer de sensores que lleven a cabo mediciones en tiempo real, son argumentos suficientes para dar explicación a por qué los modelos en la actualidad son solo aproximaciones no tan detalladas que no han sido validadas para un uso masivo a nivel industrial. Teniendo en cuenta estas consideraciones, se convierte en un reto encontrar alternativas que sean sensibles a la poca cantidad de información que se puede obtener. Como se mostrará en la siguiente sección, la manera de hacer posible una implementación de sistemas de supervisión y control será a través del uso de un modelo de balance de masa en el que se localice la falta de información. La sensibilidad para la obtención de información fenomenológica se logra gracias a la presencia de términos dedicados llamados *reaction rates* [5].

A continuación se explica la forma en la que la información contenida en la reacción de digestión anaerobia se organiza en cada uno de los términos dedicados de la ecuación general de reacciones homogéneas. Más adelante se muestra de qué manera esta información se organiza para describir un sistema en espacios de estados.

### 3.3.2 Dinámicas en un modelo general de biorreactores

Una vez una reacción de un bioproceso se ha llevado a cabo, es posible encontrar un modelo, que evolucione aplicando las reglas que se muestran a continuación [34]:

- El sistema de reacciones que se quiere estudiar involucra a  $N$  componentes  $\xi_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) y  $M$  reacciones ( $j = 1, \dots, M$ ). Las cinéticas de reacción se denotan como  $\varphi$  ( $j = 1, \dots, M$ ).
- Las dinámicas de la concentración de cada uno de los componentes  $\xi_i$  se escribe como sigue:

$$\frac{d\xi_i}{dt} = \sum_{j \sim i} (\pm) k_{ij} \varphi_j - D\xi_i - Q_i + F_i \quad (92)$$

- $k_{ij}$  son valores constantes estrictamente positivos. Tienen signo negativo cuando  $\xi_i$  es un reactante (es decir, cuando aparecen en la parte

izquierda del esquema de reacción) y son de signo positivo cuando  $\xi_i$  es un producto de la reacción (es decir, que aparece en la parte derecha de la reacción).

- $Q_i$  es la tasa de salida de la masa del componente  $\xi_i$  del reactor en forma gaseosa.
- $F_i$  es la tasa de ingreso de masa al reactor para el componente  $\xi_i$  si este se trata de un sustrato externo. En caso contrario  $F_i = 0$ .

### 3.3.3 Modelo en espacio de estados

Considerando a la ecuación (92) como punto de partida, la dinámica del proceso biotecnológico puede ser representado por la siguiente ecuación no lineal en espacio de estados:

$$\frac{d\xi_i}{dt} = K\varphi(\xi, t) - D\xi - Q + F. \quad (93)$$

La anterior ecuación está compuesta por las siguientes matrices.

$$\xi^T = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N] \quad (94)$$

$$\varphi^T = [\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_M] \quad (95)$$

$$Q^T = [Q_1, Q_2, \dots, Q_N] \quad (96)$$

$$F^T = [F_1, F_2, \dots, F_N] \quad (97)$$

$$K = [K_{ij}] : \text{ Para una matriz } N \times M \text{ con } K_{ij} = (\pm)k_{ij} \quad (98)$$

En la ecuación (93), el primer término  $K\varphi(\xi, t)$  describe la cinética de las reacciones bioquímicas y microbiológicas. Los términos restantes describen las dinámicas de transporte de los componentes a través del reactor. La distribución de (93) expresa claramente, por separado, los fenómenos físicos cinéticos y de transporte que interactúan dentro del reactor de digestión anaerobia.

### 3.3.4 Evaluación de modelos reducidos encontrados en la literatura

Como se mostró en las secciones anteriores, existen una gran cantidad de modelos enfocados en explicar el fenómeno de la digestión anaerobia. Sin embargo, estos presentan limitaciones al momento de ser considerados en implementaciones de supervisión y control. Adicionalmente, el proceso de identificación y de validación del modelo no es un proceso sencillo debido a que los datos de la experimentación no se obtienen en un amplio rango de condiciones de operación. En la práctica, estas tecnologías asumen que los procesos de digestión se llevan a cabo en reactores continuamente agitados (CSTR), sin embargo, solo intentan dar explicación al contacto que se presenta entre las superficies de las fases biológicas y materia orgánica. Además, con el aumento de la eficiencia en la producción de biogás, dentro de los reactores se genera un medio trifásico de sólido, líquido y gas, lo que

incrementa aún más el reto de modelado. En general, los modelos no se ajustan correctamente a los datos reales debido a que existe una falta de conocimiento del fenómeno, a la complejidad del proceso, a su naturaleza no lineal y a la falta o al costo de sensores para la medición de variables.

Por lo tanto, es clave la selección de modelos que incluyan la incertidumbre debido a la falta de conocimiento de los fenómenos relacionados con la digestión anaerobia. Al respecto, los modelos de balances de masa son capaces de hacerle frente a estas dificultades, localizando la falta de conocimiento en términos dedicados que representan la dinámica de crecimiento de bacterias o consumo de sustrato, llamadas cinéticas de reacción. Tomando el Modelo de Digestión Anaerobia (ADM1) como referencia para trabajar en un amplio rango de procesos de digestión anaerobia, Graef y Andrews [44] propusieron un modelo reducido propuesto inicialmente. Seguidamente, en el modelo AM2 se incluyó una segunda población de bacterias, con el objetivo de reproducir mejor la fase de desestabilización. El nuevo modelo también incluye la fase de flujo gaseoso generado, que es el biogás, que a través de flujos molares es posible saber cuánto se produce proveniente de las especies biológicas y los procesos químicos dentro del fermentador.

A continuación, se muestra la evolución de estos modelos y sus mejoras para aumentar el desempeño de las implementaciones de sistemas de monitoreo y control.

### 3.3.5 Mejoras propuestas para el modelo AM2

Luego de llevar a cabo la revisión bibliográfica de las variaciones de los modelos AM2 en la literatura, fueron seleccionadas dos alternativas que mostraron muy buenos resultados, tanto para la identificación paramétrica como en el desempeño de sistemas de supervisión y control. Tomando el sistema de ecuaciones original AM2 (131) a (136) de la anterior sección, Hassam S. et al. [67] concluye que el planteamiento original debe ser modificado. Esto es debido a que Bernard et al. [5] en su planteamiento desarrolló el modelo para describir el comportamiento de un efluente de características específicas proveniente de la industria del vino, en el que se supuso que la mezcla está compuesta principalmente por dióxido de carbono ( $CO_2$ ) disuelto y bicarbonato, despreciando la cantidad de carbonato. Adicionalmente a ello, el modelo AM2 original fue desarrollado para describir la degradación anaerobia aplicada al proceso de fermentación de residuos de la industria del vino, que contiene principalmente materia orgánica soluble basada en carbohidratos, la cual en la etapa de hidrólisis no es significativa. Por lo tanto, surge la necesidad de modificar el modelo original para describir la degradación de sustratos más complejos. La modificación que propone este autor incluye el proceso de hidrólisis y el proceso de liberación de nitrógeno amoniacal.

### Introducción a la etapa de hidrólisis y generación de nitrógeno amoniacal

El objetivo de esta modificación es hacer posible el uso del modelo en un más amplio espectro de mezclas homogéneas dentro de los reactores. Por esta razón, se incluye la etapa de hidrólisis en el modelo original AM2 que explica la degradación en compuestos solubles orgánicos, el material orgánico y los compuestos lípidos, polisacáridos y proteínas. La hidrólisis es descrita como un proceso que transforma el material orgánico en partículas solubles. La relación matemática que describe este proceso se muestra a continuación:

$$\rho_H = k_{hyd} \times X, \quad (99)$$

donde  $k_{hyd}$  es la constante de hidrólisis,  $X$  es la concentración del sustrato particulada y  $\rho_H$  es la tasa a la que se genera el proceso de hidrólisis del sustrato particulado. La mezcla de sustrato que se someterá al proceso de hidrólisis está representada por  $X_T$ , que hace referencia al sustrato total particulado que incluye a  $X_C$ ,  $X_{ch}$ ,  $X_{pr}$ , y  $X_{li}$ ; sustratos particulados del material compuesto, carbohidratos, proteínas y lípidos respectivamente. El autor propone no considerar a cada uno de los componentes por separado sino a uno solo, siendo este el valor total de todos ellos. De esta manera, la hidrólisis de  $X_T$  se representa como.



Por lo tanto, se debe adicionar la dinámica del  $X_T$  al modelo, esto es.

$$\frac{dX_T}{dt} = D(X_{T,in} - X_T)k_{hyd}X_T. \quad (101)$$

Entonces, el sustrato asociado a esta nueva consideración se puede escribir como.

$$\frac{dS_1}{dt} = D(X_{1,in} - S_1) - k_1\mu_1X_1 + k_{hyd}X_T. \quad (102)$$

Debido a que la variable de contenido de nitrógeno se adiciona a la dinámica de alcalinidad, su dinámica es.

$$\begin{aligned} \frac{dZ}{dt} = & D(Z_{in} - Z) + (k_1N_{S1} - N_{bac})\mu_1X_1 - \\ & N_{bac}\mu_2X_2 + k_{d,1}N_{bac}X_1 + k_{d,2}N_{bac}X_2 \end{aligned} \quad (103)$$

La anterior ecuación convierte a la alcalinidad en un elemento reactivo ante las especies que componen la mezcla. El valor de la alcalinidad corresponde con la sumatoria de todas las bases que cumplan con la condición de que puedan aceptar un  $H^+$ . Por lo tanto, para digestores anaerobios, las siguientes reacciones químicas aportan al valor final de la alcalinidad; el bicarbonato, los ácidos grasos volátiles, iones hidróxido, y amonio.

**Parámetros dinámicos en el modelo de digestión anaerobia** En principio, más allá de agregar nuevas variables al modelo, el trabajo presentado por Kil et al. [15] asegura que no ha sido posible implementar sistemas de supervisión y control masivamente debido a que el modelo reducido AM2, a pesar de su amplia aceptación en la comunidad científica, tiene variables que no permanecen fijas en el tiempo. Estos modelos son basados en balances de materia, en consecuencia, las cinéticas de crecimiento no pueden ser fijas durante todo el tiempo de operación del reactor. Estas cinéticas cambian constantemente debido a que la dinámica de las bacterias varía en el tiempo, por lo que es necesario plantear estrategias de estimación on-line que permitan conocer estos valores en todo momento. Con eso se supera la dificultad en poder implementar estos sistemas de control, debido a la imposibilidad de medir estas variables en tiempo real.

El autor Kil et al. [15] propone reducir la complejidad en las mediciones que deban realizarse para hacer posible una implementación en un entorno real. El modelo original AM2 se basa en las tasas de crecimiento de bacterias, sin embargo, este valor es muy difícil de medir o estimar, por lo que se propone cambiar las cinéticas originales a cinéticas de consumo de sustrato. La segunda consideración que hace el autor es que convierte las tasas máximas de degradación de sustrato a variables de estado. La tercera contribución es generalizar el planteamiento que se tenía de la dinámica de alcalinidad, en la que se supone que los sustratos que ingresan al reactor no contienen proteínas o aminoácidos. Lo anterior no cumple para todas las materias primas que se quieran trabajar. Es una suposición muy fuerte, sobre todo porque una gran cantidad de tipos de materia orgánica tienen proteínas o aminoácidos. La presencia de estos dos elementos hace que el valor de la alcalinidad cambie todo el tiempo. El amonio liberado proviene del proceso de fermentación de proteínas o el amonio consumido se debe al proceso natural de crecimiento bacteriano. Finalmente, se plantea el uso del modelo de Monod para representar el crecimiento bacteriano del grupo metanogénico, debido a que los efectos inhibitorios por la acumulación de ácidos grasos volátiles no se presentan cuando el valor de la alcalinidad es mucho mayor. De acuerdo las anteriores consideraciones, el sistema de ecuaciones que resulta es el que se muestra a continuación.

$$\frac{dS_1}{dt} = D(S_{1,in} - S_1) - \psi_1 \left( \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right), \quad (104)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = D(S_{2,in} - S_2) + k_{s2,1}\psi_1 \left( \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) - \psi_2 \left( \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right), \quad (105)$$

$$\frac{dZ}{dt} = D(Z_{in} - Z) + k_{Z,1}\psi_1 \left( \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) + k_{Z,2}\psi_2 \left( \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right), \quad (106)$$

$$\frac{d\psi_1}{dt} = D(\psi_{1,in} - \psi_1) + k_{\psi,1}\psi_1 \left( \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right), \quad (107)$$

$$\frac{d\psi_2}{dt} = D(\psi_{2,in} - \psi_2) + k_{\psi,2}\psi_2 \left( \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right), \quad (108)$$

$$q_M = k_{CH_4}\psi_2 \left( \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right), \quad (109)$$

donde  $\psi_1$  y  $\psi_2$  son las tasas de degradación acidogénica máxima ( $kgCODd^{-1}$ ) y degradación metanogénica ( $kgCODd^{-1}$ ) respectivamente. Las variables  $k_{\psi,1}$  y  $k_{\psi,2}$  son los coeficientes de la mezcla homogénea dentro del reactor.  $\psi_1$  y  $\psi_2$  representan la habilidad de las bacterias en degradar el sustrato. Por otro lado,  $\rho_1$  y  $\rho_2$  son representadas a través de las ecuaciones de Monod como sigue.

$$\rho_1 = \psi_1 \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \quad (110)$$

y

$$\rho_2 = \psi_2 \frac{S_2}{K_{S2} + S_2}. \quad (111)$$

El resto de variables que aparecen en estas ecuaciones se explican en las anteriores secciones. En la tabla 7 se hace un resumen de los parámetros que se usaron en el modelo planteado por Kil et al. [15]. Estos han sido ordenados con el fin de explicar cómo se estableció una metodología que secuencia el cálculo de los parámetros en función de su naturaleza. Este autor no solo permitió mejorar el encaje del modelo para hacer posible una implementación en la realidad, sino que estableció una serie de reglas que garantizaron una mayor robustez e identificabilidad. De acuerdo con el modelo de referencia ADM1, los coeficientes  $K_{Z,1}$ ,  $K_{Z,2}$ ,  $K_{s2,1}$ , y  $K_{CH_4}$  están estrechamente relacionados con la composición y el contenido de hidrógeno de la biomasa dentro del reactor. Los valores de estos parámetros no cambian significativamente, por lo que, alrededor de la media se pueden considerar constantes a lo largo de todo el tiempo de operación del reactor. El cálculo de estos valores se puede hacer fuera de línea utilizando las series de datos obtenidas de la experimentación. Por otra parte, las constantes  $K_{S1}$  y  $K_{S2}$  se calculan utilizando valores de la literatura. Sin embargo, al comparar los valores reportados con los obtenidos a través de simulación logrados en esta tesis, se encontraron algunas diferencias. Entonces, se incluyó este grupo de parámetros en el grupo 1 para definir un valor fijo en ellos. Finalmente, las variables que pertenecen al grupo 3,  $k_{\psi,1}$  y  $k_{\psi,2}$ , son calculadas de  $\psi_1$  y  $\psi_2$  respectivamente.

**Tabla 7:** Parámetros del modelo que van a ser identificados.

Parámetros	Tipo	Grupo
$K_{Z,1}$	Coeficiente alcalinidad	1
$K_{Z,2}$	Coeficiente alcalinidad	1
$k_{s_2,1}$	Coeficiente sistema	1
$k_{CH_4}$	Coeficiente sistema	1
$K_{S1}$	Cinética	2
$K_{S2}$	Cinética	2
$k_{\psi_1,1}$	Cinética	3
$k_{\psi_2,2}$	Cinética	3

### 3.3.6 Selección de modelo y consideraciones

El modelo descrito a continuación tiene como objetivo representar el fenómeno de desestabilización mientras sea identificable bajo ciertas condiciones de operación, por lo tanto, se asume que las poblaciones de bacterias pueden ser divididas dentro de dos grupos de características homogéneas. El primer grupo lo componen las bacterias acidogénicas ( $X_1$ ), las cuales consumen sustrato orgánico ( $S_1$ ) y producen dióxido de carbono ( $CO_2$ ) y ácidos volátiles grasos ( $S_2$ ). El segundo grupo lo componen las bacterias metanogénicas ( $X_2$ ), las cuales consumen ácidos volátiles grasos ( $S_2$ ) y producen dióxido de carbono ( $CO_2$ ) y metano ( $CH_4$ ). Desde el punto de vista hidrodinámico se asume que el reactor se comporta como un reactor CSTR, modelado como un tanque donde su contenido se encuentra perfectamente mezclado; el material que sale del reactor tiene una composición igual a la del material dentro del reactor. Estos dos estados son función del tiempo de residencia y la velocidad de reacción.

A continuación, se muestran las reacciones biológicas que corresponden con los dos grupos de bacterias considerados que intervienen en el proceso de digestión anaerobia:

- Bacterias acidogénicas: Este grupo de reacción está gobernado por una cinética de reacción  $r_1 = \mu_1 X_1$  que modela la conversión de sustrato orgánico  $S_1$  consumido debido al proceso de digestión por el grupo de bacterias acidogénicas  $X_1$ . La variable  $\mu_1$  representa la velocidad de crecimiento de bacterias acidogénicas. El sustrato orgánico  $S_1$  es caracterizado por la concentración de la demanda química de oxígeno (COD) representada en  $g/L$ . Por su parte, el sustrato orgánico  $S_2$  es representado por la concentración de ácidos volátiles grasos (VFA), con unidades  $mmol/L$ . El sustrato orgánico  $S_2$  está compuesto principalmente por acetato, propionato y butirato. Es importante notar que la medición del sustrato orgánico  $S_2$  se atribuye básicamente a acetato.



- Bacterias metanogénicas: Este grupo de reacción está gobernado por una cinética de reacción  $r_2 = \mu_2 X_2$  que tiene como objetivo modelar la conversión sustrato orgánico  $S_2$  consumido debido al proceso de digestión por el grupo de bacterias metanogénicas  $X_1$ . La variable  $\mu_2$  representa la velocidad de crecimiento de bacterias acidogénicas.



En la sección a continuación se explica cómo se llevan a cabo las reacciones físico-químicas, para las fases líquida y gaseosa, en el proceso de digestión anaerobia.

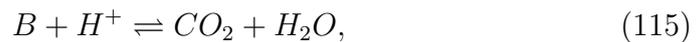
### Especies químicas

#### Carbón inorgánico

Se debe considerar las reacciones químicas que relacionan el carbón inorgánico compuesto principalmente por  $CO_2$  disuelto, bicarbonato  $B$ , y carbonato, como se lo describe en Rozzi [44] (1984). En condiciones normales de operación el rango de pH se encuentra en un valor de entre 6 y 8, y la temperatura en niveles mesofílicos de entre 35 °C y 38 °C. Bajo estas condiciones, la constante de afinidad carbonato/bicarbonato ( $K_c = 4.7 \times 10^{-11} \text{ mol/L}$ ), indica que la concentración de carbonato permanecerá despreciable comparada con el bicarbonato. El carbón inorgánico total  $C$  en el rango de operación de  $pH$  es aproximadamente.

$$C = CO_2 + B. \quad (114)$$

Por su parte, las concentraciones de bicarbonato ( $B$ ) y dióxido de carbono ( $CO_2$ ) disuelto son determinadas por las siguientes reacciones químicas.



donde  $H^+$  representa los protones. La constante de afinidad de la anterior reacción es igual a.

$$K_b = \frac{[H^+]B}{CO_2}, \quad (116)$$

donde  $K_b = 6.5 \times 10^{-7} \text{ mol/L}$ .

#### Ácidos Volátiles Grasos (VFA)

La concentración total de VFA está compuesta por iones  $S^-$  (principalmente acetato) y  $SH$  no ionizado (principalmente ácido acético).

$$S_2 = [SH] + [S^-]. \quad (117)$$

La correspondiente constante de afinidad es igual a.

$$K_a = \frac{[H^+][S^-]}{[SH]}, \quad (118)$$

donde el valor numérico de  $K_a$  en el rango de operación de  $pH$  considerado ( $K_a = 1.5 \times 10^{-5} \text{ mol/L}$ ) muestra que  $[SH]$  es despreciable, por lo tanto.

$$S_2 \simeq [S^-]. \quad (119)$$

### Balance de iones

La alcalinidad total  $Z$  es definida como la suma de los ácidos disociados en el medio.

$$Z = B + [S^-]. \quad (120)$$

Tomando la ecuación (119), se obtiene la variable  $Z$  en el rango de  $pH$  considerado.

$$Z \simeq B + S_2. \quad (121)$$

Esta suposición no es válida en el influente de biomasa, donde el valor de  $pH$  puede ser muy bajo. Por lo tanto, se debe calcular la alcalinidad del influente de biomasa con respecto al influente del bicarbonato ( $B_{in}$ ) y VFA ( $S_{2in}$ ) como sigue:

$$Z_{in} = B_{in} + \frac{K_a}{K_a + 10^{pH}} S_{2in}. \quad (122)$$

Se debe anotar que el valor de  $B_{in}$  es despreciable abajo  $pH$

### Los Gases

Se asume que el gas total de salida producto de la digestión anaerobia está compuesto principalmente por  $CO_2$  y  $CH_4$ . Debido a la baja solubilidad del metano, se asume que la concentración del metano disuelto en la mezcla sale del fermentador con un flujo molar  $q_M$  proporcional a la velocidad de reacción en la metanogénesis, tal y como se muestra a continuación.

$$q_M = k_6 \mu X_2 \quad (123)$$

Para el flujo de salida de  $CO_2$ , se debe considerar el almacenamiento del  $CO_2$  en el compartimiento del carbón total inorgánico. La velocidad de flujo molar del  $CO_2$  puede ser calculada con la ley de Henry como:

$$q_C = k_L a (CO_2 - K_H P_C), \quad (124)$$

donde la variable  $k_L a$  representa el coeficiente de transferencia líquido-gas,  $K_H$  la constante de Henry y  $P_C$  la presión parcial del  $CO_2$ . Si se asume que la presión de los gases rápidamente alcanza un equilibrio, se obtiene una relación directa entre la presión parcial y las velocidades de flujo de gases que surgen de la ley de gases ideales.

$$\frac{P_T - P_C}{q_M} = \frac{P_C}{q_C}, \quad (125)$$

donde  $P_T$  corresponde a la presión total en el fermentador (que típicamente corresponde a la presión atmosférica). Finalmente, de las ecuaciones (123) y (124) se tiene que.

$$K_H P_C^2 - \Phi P_C + P_T C O_2 = 0, \quad (126)$$

con.

$$\Phi = C O_2 + K_H P_T + \frac{q_M}{k_L a}. \quad (127)$$

El cálculo de las raíces de la ecuación (126) condiciona la solución de la siguiente manera.

$$\pi(P_T) = \frac{P_T q_M}{k_L a} < 0 \quad (128)$$

Lo anterior muestra que la raíz mayor de la ecuación (126) es mayor que el valor de  $P_T$ , por lo tanto, físicamente no es una solución factible. La única solución admisible es por lo tanto.

$$P_C = \frac{\Phi - \sqrt{\Phi^2 - 4K_H P_T C O_2}}{2K_H} \quad (129)$$

Finalmente, la concentración de  $C O_2$  puede ser computada como resultado de la combinación de las ecuaciones (114) y (121), es decir.

$$C O_2 = C + S_2 - Z \quad (130)$$

### Modelo de Balance de Masa

El modelo de producción de biogás producido a través del proceso de digestión anaerobia que considera un consorcio bacteriano de dos grupos de bacterias: acidogénicas y metanogénicas. Aquí se plantean seis dinámicas que se muestran a continuación, a partir de las reacciones consideradas en las ecuaciones (112), (113) y (114), entonces, se obtienen los siguientes balances de masa.

$$\frac{dX_1}{dt} = [\mu_1 - \alpha D] X_1, \quad (131)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = [\mu_2 - \alpha D] X_2, \quad (132)$$

$$\frac{dZ}{dt} = D(Z_{in} - Z) + k_{Z,1} \mu_1 \left( \frac{S_1}{K_{S1} + S_1} \right) + k_{Z,2} \mu_2 \left( \frac{S_2}{K_{S2} + S_2} \right), \quad (133)$$

$$\frac{dS_1}{dt} = D(S_{1in} - S_1) - k_1 \mu_1 X_1, \quad (134)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = D(S_{2in} - S_2) + k_2 \mu_1 X_1 - k_3 \mu_2 X_2, \quad (135)$$

$$\frac{dC}{dt} = D(C_{in} - C) - q_C + k_4 \mu_1 X_1 + k_5 \mu_2 X_2, \quad (136)$$

con.

$$q_C = k_L a [C + S_2 - Z - K_H P_C]. \quad (137)$$

En (137),  $P_C$  proviene del cálculo de las ecuaciones (123), (126), (128) y (129) como sigue.

$$P_C = \frac{\Phi - \sqrt{\Phi^2 - 4K_H P_T (C + S_2 - Z)}}{2K_H}, \quad (138)$$

con.

$$\Phi = C + S_2 - Z + K_H P_T + \frac{k_6}{k_L a}, \mu_2 X_2 \quad (139)$$

donde  $S_{1in}$  ( $gCOD/L$ ),  $S_{2in}$  ( $mmol/L$ ),  $C_{in}$  ( $mmol/L$ ) y  $Z_{in}$  ( $mmol/L$ ) son las concentraciones de la biomasa  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $C$  y  $Z$  respectivamente a la entrada del biorreactor. Además, tenemos el siguiente modelo de ecuaciones para la velocidad de flujo de metano.

$$q_M = k_6 \mu_2 X_2 \quad (140)$$

El cálculo del valor del  $pH$  proviene de las ecuaciones (121) y (129)

$$pH = -\log_{10} \left( K_b \frac{C - Z + S_2}{Z - S_2} \right) \quad (141)$$

**Modelo de cinética bacterial** El modelado de las cinéticas biológicas es una tarea que conlleva un gran reto y que hasta ahora no presenta una ausencia de consenso en la metodología para su cálculo. Sin embargo, O. Bernard (2001) en conjunto con otros trabajos de modelado de digestión anaerobia propuestos por [40], establece las siguientes cinéticas bacterianas, con el fin de construir un modelo simple para propósitos de control.

- **Bacterias acidogénicas:** la cinética de crecimiento del grupo de bacterias acidogénicas se modela usando la ecuación de Monod y se obtiene la siguiente expresión:

$$\mu_1 = \mu_{1max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} \quad (142)$$

donde  $\mu_{1max}$  es la máxima velocidad de crecimiento bacteriano,  $K_{S1}$  es la constante media de saturación asociada con el sustrato  $S_1$ .

- **Bacterias metanogénicas:** con el objetivo de enfatizar en la posible acumulación de VFA, se tiene que considerar las cinéticas de Haldane para describir el comportamiento de la cinética de crecimiento del grupo de bacterias metanogénicas.

$$\mu_2 = \mu_{2max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_{I2}}}, \quad (143)$$

donde  $\mu_{2max}$  es la máxima velocidad de crecimiento bacteriano fuera del estado de inhibición,  $K_{S2}$  es la constante de saturación del sustrato  $S_2$  y  $K_{I2}$  es la constante de inhibición asociada al sustrato  $S_2$ .

### 3.4 Resumen

En este capítulo se presentó el modelo de base fenomenológica EAM2 (obtenido de su predecesor AM2 propuesto inicialmente por Bernard et al. [5]) con el objetivo de representar el proceso de digestión anaerobia dentro de un reactor. Este modelo matemático fue propuesto con el objetivo de localizar la falta de conocimiento de la biología del proceso en términos dedicados llamados cinéticas de reacción. El uso de estos modelos ha sido ampliamente usado en trabajos de modelado y control probados en ambientes de simulación. El modelo EAM2 propuso la adición de dos términos adicionales para representar la fermentación de aminoácidos y el crecimiento de bacterias por medio del consumo de proteínas. La correspondiente liberación de amonio fue representada en la dinámica de alcalinidad.

---

## 4 Implementación de sistemas de control en un reactor de digestión anaerobia

Este capítulo muestra los detalles de la capacitación que se llevó a cabo durante la estancia de investigación en el laboratorio de bioprocesos en la Universidad Autónoma de Madrid. Durante ese periodo de tiempo se aprendieron las técnicas que permitieron realizar las mediciones en tiempo real y fuera de línea (off-line) en el reactor de digestión anaerobia en operación y cada uno de sus componentes, tal como ocurre cuando la información es medida en un entorno industrial real. En esta sección se explican las técnicas que se usaron para realizar cada una de estas mediciones.

### 4.1 Introducción

El objetivo de este capítulo es modelar el proceso de biodigestión anaerobia (sistema del proceso) que será usada para probar las estructuras de estimación-control propuestas en este trabajo de investigación. La propuesta para la descripción del reactor de digestión anaerobio va más allá de lo que comúnmente se ha hecho hasta el momento, esto es, en lugar de usar un reactor con un modelo matemático con datos genéricos, se realizó la identificación de un sistema anaerobio real a través de la estimación paramétrica de un modelo matemático para ajustar los datos obtenidos experimentalmente. En este sentido, casi la totalidad de los trabajos de investigación usan como reactor anaerobio a un modelo matemático general simulado referencia llamado ADM1 [5, 15, 40]. Este modelo fue desarrollado en el año 2001 con el objetivo de crear una plataforma de simulación de base común que trabaje en un amplio rango de procesos particulares en términos operativos y en las condiciones químicas y físicas debido a la biomasa seleccionada [14]. Así mismo, los datos experimentales provienen de un reactor de digestión anaerobia que funcionó durante un periodo de tiempo de un año. Este reactor de 150 litros trabajó como sistema depurador de aguas residuales en Huelva, España. Para lograr un buen ajuste del modelo matemático a los datos experimentales se debió superar un umbral calidad, además de esto, se debió hacer una limpieza de los datos medidos.

El trabajo de experimentación en el laboratorio se convierte en una actividad necesaria para el perfil del investigador debido a que este proyecto está constituido sobre una base de disciplinas múltiples. Por esta razón, con el fin de cumplir con el enfoque teórico-práctico de esta tesis, surgió la necesidad de realizar tanto el montaje experimental como el mantenimiento de la operación del reactor. Todo lo anterior permite plantear mejoras en el sistema, a través del uso de técnicas avanzadas de control y estimación, ya que con el conocimiento del proceso se pueden generar las actuaciones que optimicen el comportamiento físico y biológico de los microorganismos dentro del reactor [14]. En la siguiente sección se describen las pruebas de laboratorio que se llevaron a cabo para realizar las mediciones de las variables de interés. También se explicará de qué manera fueron usados los equipos vinculados al experimento.

## 4.2 Técnicas experimentales para la toma de datos

### 4.2.1 Funcionamiento del reactor y estructura de control

En esta sección se muestran los detalles de la toma de datos experimentales y la evidencia de la transferencia de conocimiento que se llevó a cabo en el laboratorio de bioprocesos de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid a cargo del personal de investigación. En principio, comencemos con la explicación de cada uno de los componentes que aparecen en la Figura 16, en la que aparece el esquema de un reactor de digestión anaerobia (Sistema) y de algunos componentes electrónicos que deben ser conectados para realizar la toma de datos durante su operación.

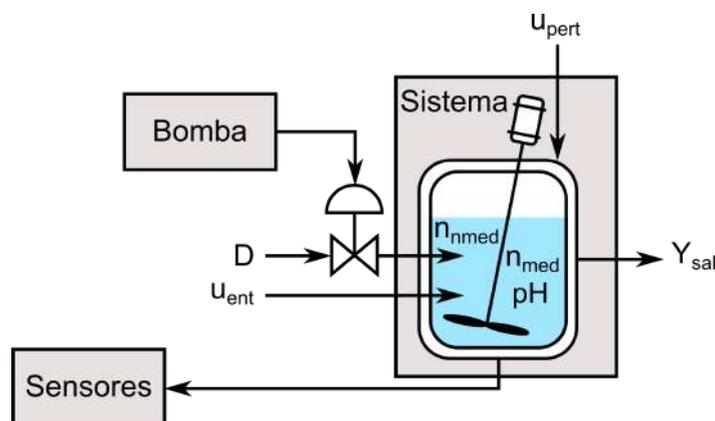


Figura 16: Esquemático del reactor de digestión anaerobia.

Como se observa en la Figura 16, el recuadro marcado como *Bomba* representa el dispositivo que se encarga de regular el flujo de entrada de carga orgánica al reactor. Por otro lado, el recuadro *Sistema* contiene al reactor de digestión anaerobia de mezclado uniforme. Como se observa, se ve una pala mecánica que se encarga de homogeneizar la mezcla dentro del reactor constantemente (que para el caso del experimento llevado a cabo en el laboratorio el mezclado se garantizó con el flujo de la carga orgánica que ingresó por la parte inferior). Nótese que aunque solo existe un único flujo

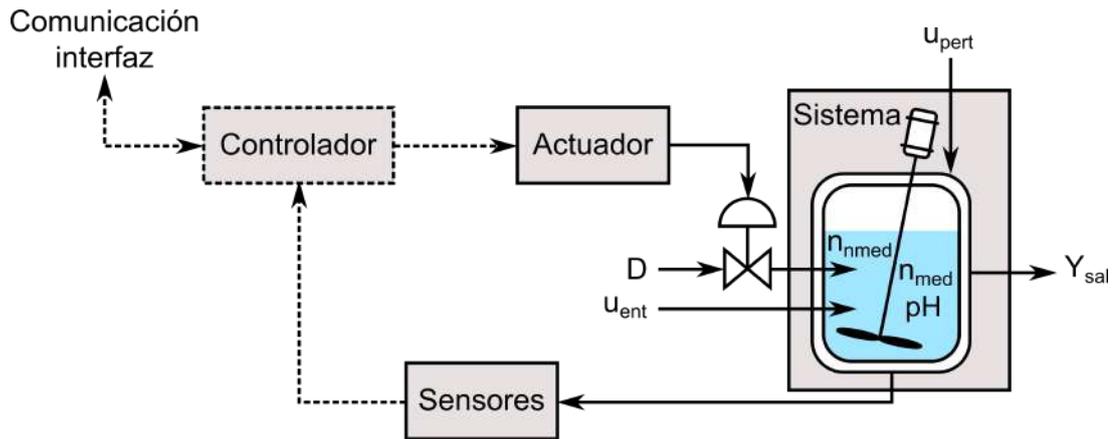
de ingreso de material al reactor a través de la bomba, la otra entrada  $U_{ent}$  representa el resto de componentes que se encuentran en el influente. Estos componentes son la demanda química de oxígeno  $DQO_{in}$ , los ácidos grasos volátiles  $VFA_{in}$ , la alcalinidad  $Z_{in}$ , el bicarbonato  $B_{in}$  y el nivel de  $pH_{in}$ . Lo comentado justo anteriormente permite diferenciar los dos tipos de entradas: las controladas y las no controladas. La variable  $U_{pert}$  representa las perturbaciones que ingresan al reactor desde el exterior, desde el punto de vista del sistema, son las acciones externas que generan cambios no deseados en variables como la temperatura (aunque no es modelada porque solo se garantiza que esta variable se encuentre en una banda de temperatura termofílica). La variable de salida  $Y_{sal}$  contiene la información de la concentración de las poblaciones de bacterias,  $X_1$  y  $X_2$ , los sustratos para cada uno de estos grupos poblacionales,  $S_1$  y  $S_2$ , la alcalinidad  $Z$ , y el carbono inorgánico  $C$ . Por otro lado, el recuadro *Sensores* contiene la información tanto de las variables que se pueden medir directamente a través del uso de sensores o pruebas de laboratorio, como las variables que se pueden medir off-line. Lo anterior está representado por  $n_{med}$  y  $pH$  que corresponde con las variables medidas y el nivel de  $pH$  respectivamente. Hay un tercer grupo de variables dentro de la reacción que son las variables no medidas  $n_{nmed}$ . Ellas representan las variables que requiere el modelo y no es posible medir directamente con sensores o pruebas de laboratorio.

Usando una estructura clásica de control sobre el bioproceso, la Figura 17 describe cada uno de los elementos del sistema que son necesarios para llevar a cabo este propósito. Aquí, el recuadro *Controlador* es adicionado a la estructura de la anterior Figura 16. Su función consiste en procesar la información que se toma en el recuadro *Sensores* directamente de la *Sistema*, y así tomar decisiones que permitan cumplir con los objetivos con los que fue diseñado. Las decisiones son entregadas al recuadro *Actuador*, quien es el encargado de hacer las ejecuciones sobre la *Sistema*. El recuadro *Bomba* en la anterior Figura 16, que se programaba de forma manual, ahora es remplazado por el recuadro *Actuador*, quien es el que ejecuta las acciones sobre la *Sistema*. Finalmente, el lugar en donde dice *Comunicación interfaz*, se encuentra el lugar en donde se lleva a cabo el intercambio de información entre el usuario, quien es la persona que manipula el sistema, y el sistema autónomo.

En la siguiente sección se explica cómo se debe llevar a cabo el proceso de montaje y de medición cuando el reactor de digestión anaerobia se encuentra en operación.

### 4.2.2 Procedimiento para la experimentación

En esta sección se explica cada uno de los procedimientos que se llevaron a cabo en el laboratorio para realizar el montaje experimental del reactor de digestión anaerobia. Cada uno de los componentes mostrados en las siguientes figuras están relacionados con la estructura de control y monitorización mostrada en la Figura 17. A continuación, la información se organiza de tal manera que para cada uno de los componentes existe evi-



**Figura 17:** Estructura de control para el reactor de digestión anaerobia.

dencia fotográfica y una explicación del procedimiento que se llevó a cabo en el laboratorio.

### Sistema

En la Figura 17, el recuadro *Sistema* tiene asociado la información de las entradas y salidas de un reactor de digestión anaerobia. Pongamos entonces al reactor de digestión anaerobia como pieza central del montaje experimental. En la Figura 18 se muestra el reactor que fue usado en el laboratorio, cuyo recipiente tiene una capacidad total de 5.5 litros (se muestran dos).



**Figura 18:** Equipos e instrumentación en el Laboratorio de Bioprocesos.



(a) Reactor tubular vacío.



(b) Reactor tubular con inóculo.

**Figura 19:** Reactores de digestión anaerobia, antes y durante llenado con inóculo.

La geometría y diseño de los reactores de acrílico permiten observar lo que ocurre en la parte interna, es decir, la manera en que el contenido del reactor se mezcla debido al ingreso del influente por la parte inferior y cómo se produce biogás debido al metabolismo de los microorganismos anaerobios.

En la Figura 19a se observa con mayor claridad el diseño geométrico del reactor. La tubería elástica que transporta el influente entra por la parte inferior del reactor para generar un mezclado del contenido del mismo. La fotografía permite observar la tubería que conecta la chaqueta de regulación térmica con la piscina de agua. El continuo flujo de agua hacia las paredes del reactor permite mantener el reactor en rango de operación termofílico. Esta unidad es controlada con un dispositivo PID (Proporcional, Integral, Derivativo), en el que una resistencia dentro de la piscina de agua y espuma aislante en la parte superior, mantienen la temperatura en alrededor de los  $55^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$ . Por otro lado, en la Figura 19b se muestra la manera en que se lleva a cabo el proceso de llenado del reactor con el inóculo que fue preparado previamente en el laboratorio. Antes de dar inicio al proceso experimental, se debe esperar unas horas hasta que la materia orgánica que contiene a las bacterias se desplace a la parte inferior del contenedor. También se adiciona una dosis baja de sacarosa para hacer que el grupo de bacterias pasen del estado de letargo o adormecimiento en el que se encuen-

tran debido a la inactividad producto de su almacenamiento. Se debe llenar el tanque hasta su nivel máximo antes de encender la bomba y comenzar con la circulación del material orgánico, sobre todo porque es por esta zona superior por donde sale el efluente. La Figura 20 muestra la manera en la que el agua se ingresa a la piscina de control de temperatura. A pesar de que se logra aislar el líquido contenido en la piscina del ambiente, mediante fragmentos de espuma aislante en la parte superior, el sistema debe ser alimentado con agua continuamente debido a que constantemente hay pérdidas por efecto de la evaporación.

Al final, en la Figura 21a se observa al reactor lleno por completo justo antes de dar inicio al experimento. El área exterior del reactor se ha cubierto con un aislante térmico que permite conservar mejor el calor dentro del rango termofílico, ver Figura 23a. Por su parte, en la Figura 21b se muestra el depósito, que se ha preparado previamente en laboratorio, que es usado para extraer el material orgánico del reactor. De este lugar proviene un único flujo de entrada, sin embargo, como se observa en la Figura 17, los flujos de entrada se dividen en dos grupos; controlados y no controlados, asignados a las variables  $D$  y  $u_{ent}$  respectivamente. El valor que tomó la variable  $D$  durante la experimentación se programó previamente en el software de la bomba. La información de las variables contenidas en  $u_{ent}$  se midió directamente en el influente. Las variables de salida,  $Y_{sal}$ , que aparecen en la Figura 17 son medidas directamente del efluente. La variable  $u_{pert}$  representa las perturbaciones que se consideran desde el punto de vista del modelado, estos valores están asociados a los cambios bruscos que no pueden ser anticipados en las variables medidas en el influente  $u_{ent}$ .



Figura 20: Unidad recirculación térmica para la chaqueta del reactor.

## Bomba

En la Figura 22 se observa la bomba que aparece referenciada en el recuadro de la Figura 16. En esta parte del montaje experimental es donde se fija un valor para la variable  $D$ , o en su defecto el valor correspondiente de tasa de ingreso de carga orgánica (OLR). Si se hace una comparación de la Figura 16 con respecto a la Figura 17 se observa que en el recuadro que contiene la palabra *Bomba* es cambiada por la palabra *Actuador*. Esto se debe a que cuando un sistema de control es instalado, este es quien provee de los valores de  $D$  automáticamente dadas las condiciones de operación del sistema y los objetivos en el diseño del automatismo. Como se observa en la Figura 21(b), este compartimiento permanece refrigerado para poder garantizar su conservación. El experimento estuvo en operación durante aproximadamente un mes, lo que obligó a que con regularidad se debía chequear el contenido dentro del reactor para no interrumpir el flujo de material hacia el mismo.



(a) Llenado total del reactor antes de inicio experimento.



(b) Reactor con inóculo.

**Figura 21:** Programación de tasa de carga orgánica en el reactor.

## Sensores

En la Figura 17, el recuadro *Sensores* representa al proceso de medición de las variables que se necesitan para que el proceso funcione correctamente. Se consideran dos conjuntos de variables, las no medidas  $n_{nmed}$  y las medidas



Figura 22: Conexión de bomba con el influente del reactor.

$n_{med}$  así como el valor del  $pH$ . Hay variables que se miden directamente con el uso de sensores y pruebas en laboratorio, mientras que hay otras que no se pueden medir.

### 4.2.3 Medición de datos experimentales

En esta sección se explicará la manera en que se llevaron a cabo las mediciones de las diferentes variables mediante el uso de sensores, a través del uso de equipos de laboratorio.

#### Medición de biogás

El biogás que se produce por la acción de las bacterias dentro de la mezcla de reacción homogénea viaja hasta la parte superior, donde se concentra en una especie de cono invertido que transporta el gas hasta un sensor de flujo que contabiliza el volumen total producido. La Figura 23a muestra la conexión que existe entre la parte superior del reactor y el sensor de volumen de gas producido. También se observa la disposición final del efluente, que, para propósitos de laboratorio, fue depositado en un recipiente.

#### Medición de sólidos totales suspendidos

La medición que se explica a continuación hace parte del grupo de procedimientos que se realizaron con los equipos de laboratorio, por lo tanto, se clasifican como off-line. Esto se debe a que no existen sensores que proporcionen esta información de manera automática y confiable. La Figura 23b muestra los filtros de fibra de vidrio (microfibra) de borosilicato que fueron



(a) Efluente del reactor conectado a vertedero.

(b) Obtención de sólidos totales suspendidos luego de prueba de filtrado.

**Figura 23:** Posición final del reactor y mediciones off-line en laboratorio.

usadas para separar las partículas que se encontraban dentro del efluente. La permeabilidad de esta película es muy elevada, esto le permite dejar pasar fluidos con una buena velocidad, lo que le permite hacer una evaluación de muestras de grandes cantidades de volumen. Con un diámetro de 47 mm, este material es de uso estándar para la captura de sólidos en suspensión para diferentes tipos de aguas que contengan carga orgánica. Por otro lado, la Figura 24 muestra la manera en que fue conectado el dispositivo de filtrado, que con la ayuda de la presión del flujo del agua de la llave se creó un vacío que permitió la circulación del líquido de la muestra a través del filtro. El frasco para filtrar que se usó tiene en la parte superior un soporte que se usa para poner el papel de fibra de vidrio.

En la Figura 25a se observa el resultado obtenido del proceso de filtrado que se obtuvo con la muestra tomada directamente del reactor tubular de la Figura 21a. Las partículas que se observan suspendidas en la Figura 25a la parte superior son los grupos de bacterias que se retuvieron en el proceso de filtrado. El siguiente paso consiste en llevar la muestra resultante a una siguiente etapa en la que se cuantifique la cantidad de sólidos totales suspendidos.

Las muestras obtenidas del proceso de filtrado son almacenadas a 4°C. La parte disuelta es obtenida luego de realizar una centrifugación por un tiempo de 15 minutos a 15000 rpm. El residuo resultante se coloca en un recipiente



**Figura 24:** Obtención de sólidos suspendidos totales.



(a) Sólidos totales suspendidos.



(b) Muestras de filtrado en horno.

**Figura 25:** Filtro de microfibras de vidrio.

cerámico en un horno a una temperatura de 105°C. Luego de 24 horas, el recipiente se pone sobre una balanza de precisión para conocer su peso exacto que equivale a cuantificar el peso de los sólidos totales suspendidos, Ver Figura 25b. Finalmente, el recipiente es dispuesto nuevamente en un horno, pero ahora a 550°C por un tiempo de 2 horas. El recipiente cerámico es pesado nuevamente. La diferencia entre ambos valores nos entrega el valor de los sólidos volátiles suspendidos [5], ver Figura 26.

### Medición de ácidos grasos volátiles

El protocolo para la medición de esta variable es el siguiente. En primer lugar, se deben extraer 900  $\mu\text{L}$  del efluente y se deben mezclar con 150  $\mu\text{L}$  de ácido fosfórico  $\text{H}_3\text{PO}_4$  (1:2 V:V) para ajustar el valor del  $\text{pH}$  por debajo de 2. Finalmente, el resultado se mezcla con 150  $\mu\text{L}$  de una solución de ácido crotónico  $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_2$  (2000  $\text{mgL}^{-1}$ ) de acuerdo con el estándar. Esta mezcla debe ser centrifugada con el objetivo de remover cualquier tipo de sólidos para que luego se pueda transferir en conjunto con 1500  $\mu\text{L}$  por el vial de gas del cromatógrafo; la muestra del volumen de inyectado fue de 1  $\mu\text{L}$ .



**Figura 26:** Medición de sólidos volátiles suspendidos por diferencia.

La temperatura del inyector y el detector se mantuvieron a una temperatura entre los 200 °C y los 500°C respectivamente, mientras que la columna de temperatura incrementó su valor desde los 120°C hasta los 106°C, con

incrementos de  $10^{\circ}\text{C}$  por cada minuto transcurrido [5], ver Figura 27. En la siguiente sección se describe de qué manera se tomaron los datos, durante casi un año de operaciones, en un experimento llevado a cabo en un reactor CSTR de 150L. El reactor funcionó en un sistema de tratamiento de aguas residuales en Jerez de la Frontera, España.

### 4.3 Datos experimentales

El reactor anaerobio que fue usado para llevar a cabo la experimentación es un reactor continuamente agitado (CSTR) con un volumen de 150L. Este sistema operó en un rango de temperatura termofílico de  $55 \pm 2^{\circ}\text{C}$  usando un sistema de control de recirculación con agua a través de una espiral térmica. El reactor inició sus operaciones con un sustrato que trabaja en un rango de temperatura termofílico. Además, el flujo de recirculación fue dispuesto en la parte inferior del reactor a través de la acción de una bomba centrífuga en la parte superior del reactor, con el objetivo de mantener las condiciones de mezcla homogéneas [11]. El reactor fue alimentado con lodos primarios y secundarios pre-acondicionados, provenientes de un reactor anaerobio de tratamiento de aguas residuales de Guadalete (Jerez de la Frontera, España). El estudio se llevó a cabo durante 338 días, donde se midieron variables de manera regular en diferentes periodos de tiempo para monitorizar el desempeño del sistema.



**Figura 27:** Cromatógrafo para medición de VFA.

El objetivo del experimento fue operar el sistema con cambios en los valores del flujo de carga orgánica (OLR) y evaluar el desempeño de la capacidad de producción de biogás y el mantenimiento de la mezcla dentro del reactor en un estado de bienestar para los grupos de bacterias. Los valores de OLR

**Tabla 8:** Valor de OLR para cada uno de los días del experimento.

OLR	Días	
	Inicio	Fin
75	1	45
40	46	85
27	86	170
20	171	253
15	254	323

con los que se trabajaron a lo largo de la experimentación son los que se muestran en la Tabla 8.

Para el caso en el que el valor del SRT fue de 75 días, en el inicio del experimento, la velocidad de carga orgánica fue de  $0.4 \text{ KgVS}/\text{m}^3 \text{ día}$  (equivalente a  $0.8 \text{ KgCOD}/\text{m}^3 \text{ día}$ ). Luego, el valor del SRT decreció durante todo el tiempo de la experimentación en cuatro ocasiones, formando un escalón de valores; 40 días, 27 días, 20 días, y 15 días. Inmediatamente, el valor del SRT cambiaba, este se mantuvo constante durante un periodo de tiempo prolongado hasta que el sistema alcanzara la condición de estado estacionario. En algunos momentos, una cantidad pequeña de carbonato de sodio fue adicionada a una concentración de 2N para mantener el proceso de digestión en un nivel óptimo de  $pH$  para un rango termofílico (0.5L se adicionaron en cada momento que el valor del  $pH$  bajaba de 7.3) [11]. Las principales características de los lodos de alimentación que fueron usados se muestran en la tabla a continuación.

**Tabla 9:** Principales características del lodo usado en el experimento.

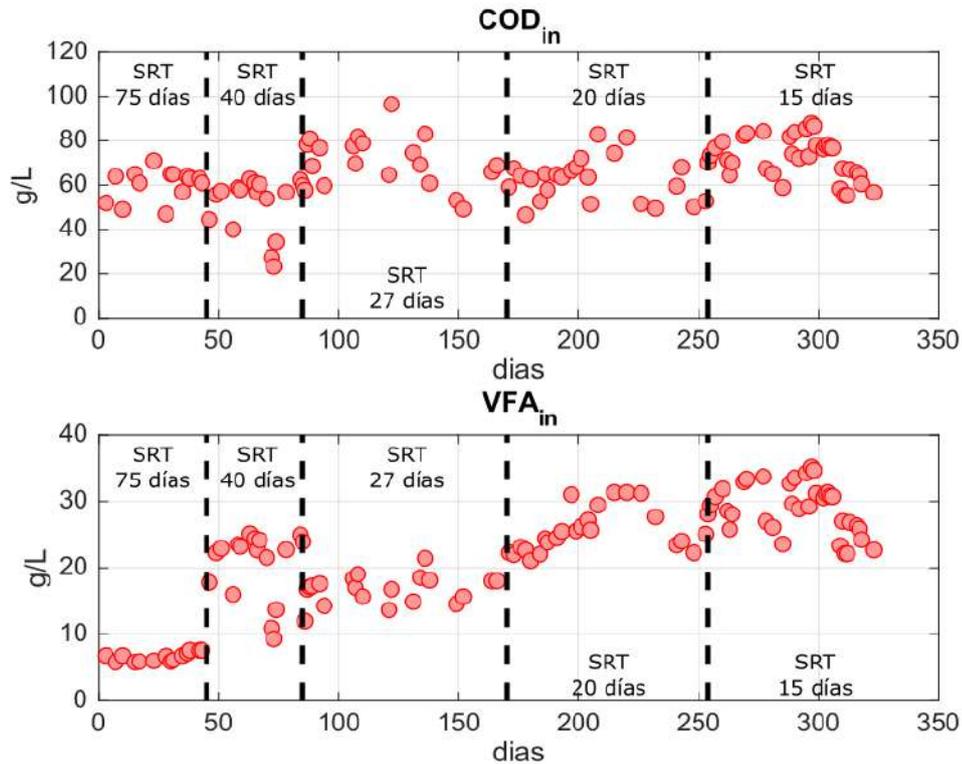
Parámetro	Valor medio	Valor mínimo	Valor máximo
COD ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	64	42	74
pH	6.2	5.8	6.4
Sólidos totales ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	55	38	68
Sólidos volátiles ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	35	27	51

Durante este experimento, se utilizaron unos indicadores (una gran cantidad de variables que se midieron periódicamente) que permitieron saber cuál fue el desempeño del sistema ante los cambios ocasionados en el valor del SRT. En concreto, de todos estos indicadores fueron seleccionados los que eran útiles para el modelo AM2 que son la demanda química de oxígeno (COD), los sólidos volátiles (VS), el volumen de producción de biogás (y la proporción de su composición de metano  $CH_4$  y dióxido de carbono  $CO_2$ ), el nivel de  $pH$ , el valor de la alcalinidad y los niveles de ácidos volátiles grasos (VFA). En el influente, la información que fue considerada fue el valor de  $COD_{in}$  y  $VFA_{in}$ . El prefijo *in* hace referencia al material que circula a través del influente al reactor. De acuerdo con lo anterior, las dos gráficas que aparecen en la Figura 28 son la demanda química de oxígeno (COD) y el valor de los ácidos volátiles grasos (VFA) a la entrada del reactor.

En la Figura 28 se muestra el valor que se obtuvo de  $COD_{in}$  y  $VFA_{in}$  durante todo el tiempo de experimentación. Se observa que el valor de  $COD_{in}$  se mantiene en una banda de valores de entre los 60 g/L y los  $\pm 40$  g/L. En algunos momentos la desviación es un poco mayor, sin embargo, al grado de dispersión tiende a mantenerse durante todo momento. Para el caso de  $VFA_{in}$ , para los primeros 45 días, cuando el valor del SRT era de 75 días, su valor tiene muy poca dispersión, rondando el valor medio de los 8 g/L. Cuando el valor de SRT cambió a 40 días, el valor de  $VFA_{in}$  se mantuvo cerca de los 22 g/L, con algunos valores dispersos alejados del valor medio. Para los rangos de tiempo en el que los valores de SRT fueron de 27 días, 20 días y 15 días, el valor de  $VFA_{in}$  tuvo un comportamiento relativamente creciente. El valor creciente en  $VFA_{in}$  es proporcional al nivel de producción de  $CH_4$ .

Para el caso de los valores de  $COD$  y  $VFA$  en el efluente, los resultados se muestran en la Figura 29. En estas figuras hay tendencias en los datos que deben destacarse, por ejemplo, el valor de  $COD$  para los primeros 85 días fue muy similar, tuvo muy poca variabilidad alrededor de los 18 g/L. De ahí en adelante, el valor de  $COD$  subió repentinamente hasta los 40 g/L y se mantuvo en una banda entre los 40 g/L y los 60 g/L. La dispersión que se evidencia es mucho mayor comparada con los dos primeros tramos del experimento. Por su parte, el valor de  $VFA$  en el efluente fue muy variable para los primeros 45 días, se mantuvo con una variación baja en el siguiente tramo de tiempo, donde el valor del SRT fue de 40 días, entre los días 46 y 85, en un valor de alrededor de 3 g/L. Sin embargo, para el resto del tiempo de experimentación, el valor giró alrededor de los 6 g/L  $\pm 2$  g/L, con una alta dispersión.

Finalmente, la Figura 30 muestra los valores de la producción de metano  $CH_4$  resultante del proceso de producción de biogás y el valor del nivel de pH que se midió en el efluente a lo largo de todo el tiempo de experimentación. El valor del  $CH_4$  tiene comportamientos muy característicos para cada una de las cinco franjas de tiempo. El volumen del gas fue medido directamente con un sensor de flujo de masa, mientras que la composición del gas fue medida con un cromatógrafo. En el inicio, en la primera franja de tiempo, cuando el valor de SRT es de 75, que es la fase de latencia de los microorganismos, se describe el periodo en el que las bacterias metanogénicas se encuentran en una fase de transición o letargo, que para el caso del experimento, ocurrió cuando los microorganismos pasaron de no tener ningún tipo de estimulación externa y actividad a recibir constantemente sustrato del exterior. Por esta razón, en la Figura 30 se observa que al valor del  $CH_4$  es muy bajo y le toma varios días (alrededor de 40 días) superar esta etapa. Desde ese momento el comportamiento de las bacterias metanogénicas cambia y es acorde con las variables del flujo de entrada y condiciones de la mezcla homogénea. Para cuando el valor del SRT es de 40 días, el valor del  $CH_4$  aumenta progresivamente hasta alcanzar un valor de producción de alrededor de 40 litros por cada día.



**Figura 28:** Variables medidas en caracterización del influente.

Además, la Figura 30 muestra en la siguiente ventana de tiempo que el valor del  $CH_4$  se mantuvo con pocas variaciones. Luego de alcanzar el valor de producción de 40 litros por cada día en la anterior etapa, esta se mantuvo durante la tercera ventana de tiempo, cuando el sistema fue alimentado con un valor de SRT de 27 días. Entonces, es posible que en este periodo de tiempo el sistema estuviera cerca de alcanzar el estado estacionario, dado que como se observa, la dispersión fue baja. Para el caso en el que el reactor anaerobio trabajó con un valor de  $SRT$  de 20 días, la producción de  $CH_4$  creció solo un poco sin mostrar una tendencia clara ascendente. Al final de este periodo de tiempo, el sistema se estabilizó. En el último periodo de tiempo, el valor de  $CH_4$  creció mucho a diferencia de otras etapas en el experimento. El comportamiento fue en general muy variable. Se alcanzaron tasas de producción de  $CH_4$  de alrededor de 115 litros por cada día, mientras que en otros momentos este valor descendió considerablemente hasta los 20 litros por cada día. Esto quiere decir que muy seguramente el sistema se encontraba trabajando muy cerca de su límite operacional.

Para el caso del valor del  $pH$ , este se mantuvo en un valor cercano a 7.7. Este valor corresponde con un nivel operativo adecuado para el bienestar de las bacterias dentro de la mezcla homogénea.

Sin embargo, cabe resaltar que su valor decreció por debajo de 7.5 justo en el momento en que el valor de SRT cambió a 15 días y que la cantidad de metano correspondiente producido aumentó considerablemente, lo

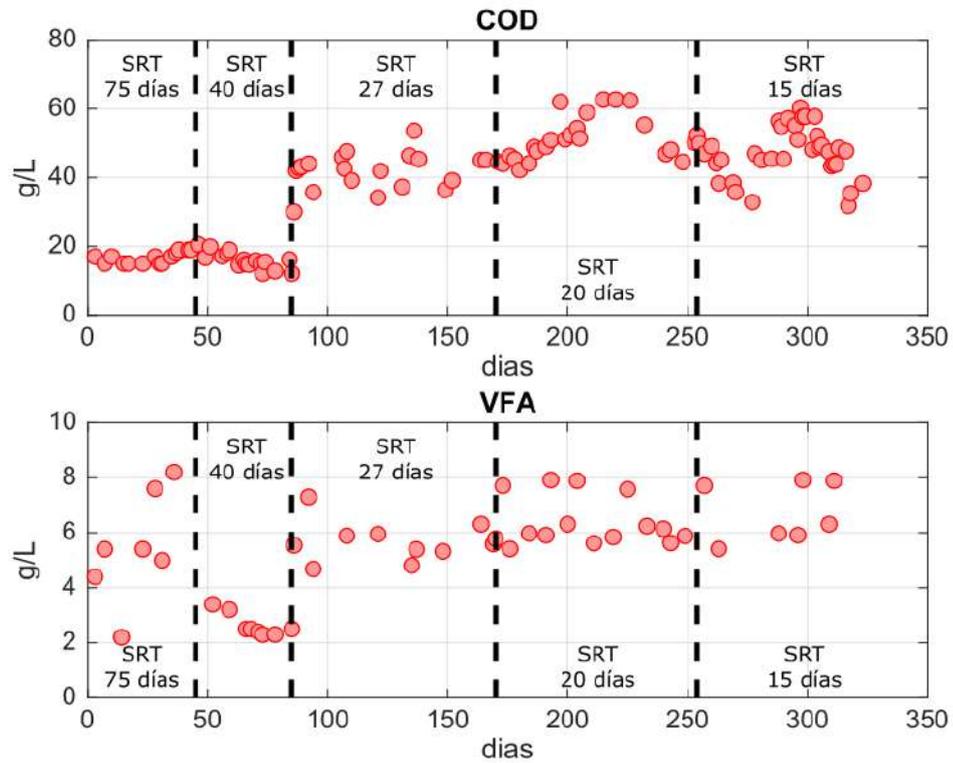
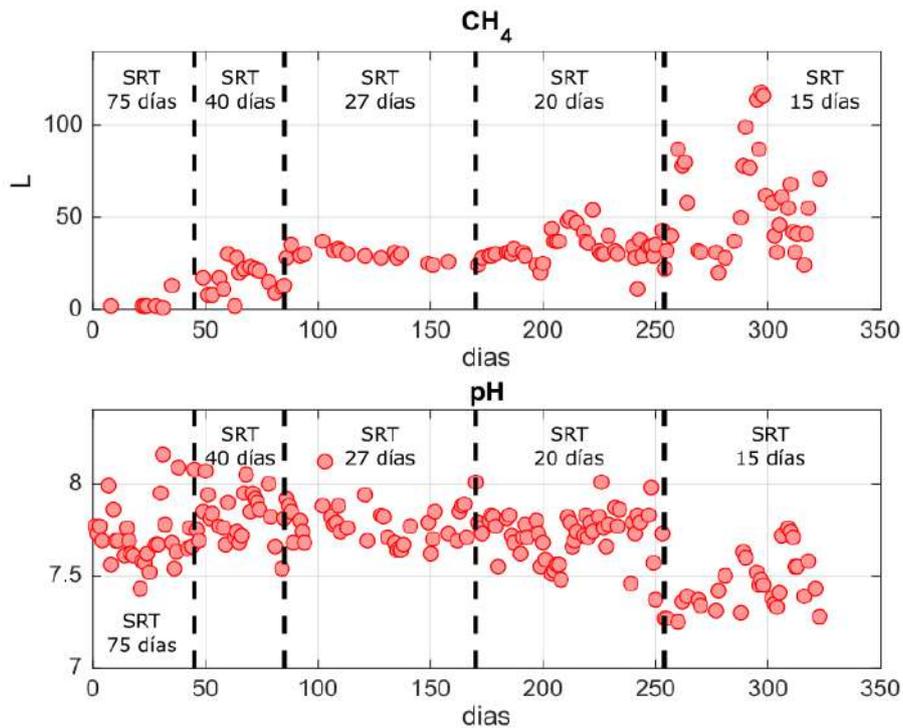


Figura 29: Variables medidas en el efluente

Figura 30: Producción de metano  $CH_4$  y estado del  $pH$ .

que permite concluir que hay una relación muy estrecha entre estas dos variables. Hay que resaltar que no es frecuente alcanzar las condiciones de estado estacionario debido a que los reactores están sujetos a cambios en las condiciones del flujo de entrada como se observa en la Figura 28. Al evaluar los datos de la producción de  $CH_4$  que se muestran en la Figura 30, se determinó que, para propósitos de modelado, hay secciones de información que serán descartadas debido a que las bacterias se encuentran en un estado de operación atípico. Esto se ha debido a que, por ejemplo, en la primera sección, para el periodo de tiempo comprendido entre los días 1 al 45, el proceso se encuentre en fase de latencia, es decir, las bacterias se encuentran lejos de una actividad metabólica adecuada. Aunque se evidenció un aumento en la producción del nivel de  $CH_4$  al final de este periodo, la dinámica de las bacterias muestra que no se alcanzó una región de estabilización. Por lo tanto, la información oscilante al final de este periodo de tiempo se descartó con el objetivo de no condicionar el ajuste del modelo a los datos. Como se observa más adelante en la Figura 30, sí fue posible mejorar la producción de  $CH_4$  en la medida que se introdujeron variaciones en el valor de SRT, sin embargo, no se logró estabilizar el sistema alrededor de un punto de operación. Los datos que se muestran en la última zona del experimento también fueron descartados por su alta variabilidad, por lo tanto, el segmento de tiempo que finalmente fue seleccionado comprende el periodo de tiempo entre los días 46 a 254.

En la sección a continuación se explican los métodos que fueron usados para llevar a cabo el ajuste del modelo a los datos experimentales. Estas estrategias fueron encontradas en los artículos científicos reportados en la literatura.

#### 4.4 Métodos para la estimación de los parámetros del modelo

Para llevar a cabo el proceso de ajuste del modelo matemático a los datos experimentales, en la literatura se han encontrado varios métodos que dependen principalmente de dos factores; el tipo de modelo que se ha seleccionado para representar el proceso, y la calidad y tipo de datos con los que se cuente. En las secciones a continuación se presentan las alternativas más usadas que se usan para llevar a cabo la estimación de parámetros, así como la evaluación de su desempeño. La primera alternativa, la estrategia de recetas de regresión lineal, fue propuesta por autor Bernard et al. [5]. Aquí, los cálculos son realizados para cuando el sistema ha alcanzado el estado estacionario (esto se asume que ocurre cuando han pasado alrededor de 25 días, que es cuando el sistema tiende a estabilizarse). La segunda alternativa es presentada en la sección a continuación y consiste en encontrar los valores de los parámetros solucionando un problema de optimización, en el que se minimiza el error entre los datos del modelo y los datos experimentales, para ajustar los parámetros. A continuación, se muestran los detalles.

#### 4.4.1 Regresiones lineales

Para llevar a cabo la identificación paramétrica del modelo AM2, Bernard et al. [5] propone analizar el comportamiento del sistema una vez este haya alcanzado el estado estacionario, es decir, cuando el sistema logra estabilizarse. Es en este momento que se logra apreciar la dependencia que existe entre las variables que entran al reactor y las variables que son medidas para conocer el estado de la reacción homogénea. Cuando el sistema se encuentra en el camino de converger a una región de estabilidad, que es cuando se encuentra en estado transitorio, estas relaciones son mucho más difíciles de apreciar.

Para evaluar el método de regresiones lineales, se tomaron los datos experimentales que llevó a cabo M. A. de la Rubia [11]. En particular, se tomaron los datos experimentales para cuando el sistema trabajó con valores de SRT de 40 días, 27 días y 20 días. Lo anterior quiere decir que el sistema fue alimentado por flujos de biomasa con concentraciones distintas. La variable que representó este efecto es la tasa de dilución ( $D$ ), que se considera como la única entrada controlada del sistema. Por lo tanto, para cada valor de  $D$ , el sistema va a converger a un estado estacionario diferente, en un tiempo de estabilización aproximado de 21 días (este valor se obtuvo a través de análisis de los resultados en gráficas). Las ecuaciones del sistema en estado estacionario se obtuvieron para la condición en donde las variables de estado permanecen en un valor constante, es decir, para cuando la variación de estas ecuaciones, (131) a (136), son iguales a cero. A continuación se muestran los resultados.

$$\mu_1 = \alpha D \quad (144)$$

$$\mu_2 = \alpha D \quad (145)$$

Si se cumple que  $\mu_{1max} > D$ , entonces, el valor de  $S_1$  en estado estacionario es igual a:

$$S_1^* = K_1 \frac{\alpha D}{\mu_{1max} - \alpha D}. \quad (146)$$

De igual forma, los estados estacionarios de la dinámica  $S_2$  provienen de la ecuación (145). La velocidad de crecimiento de las bacterias metanogénicas  $\mu_2$  comienza a aumentar desde cero, alcanza un único valor máximo y luego decrece hasta cero nuevamente. Por lo tanto, esta actuación admite dos soluciones, que puede reducirse a solo una si cumple con  $\alpha D \leq \max(\mu_2)$ . Esto implica que:

$$D \leq \frac{\mu_{2max}}{\alpha} \frac{\sqrt{K_{I2}}}{\sqrt{K_{I2}} + 2\sqrt{K_{S2}}}. \quad (147)$$

La solución de la dinámica  $S_2$  proviene de la siguiente ecuación:

$$\frac{S_2^2}{K_{I2}} + \left(1 - \frac{\mu_{2max}}{\alpha D}\right) S_2 + K_{S2} = 0 \quad (148)$$

Finalmente, solo se considera la siguiente solución para la dinámica  $S_2$  en estado estacionario:

$$S_2^* = \frac{-\left(\frac{1-\mu_{2max}}{\alpha D}\right) + \sqrt{\left(\frac{1-\mu_{2max}}{\alpha D}\right)^2 - 4\frac{1}{K_{I2}}K_{S2}}}{2\frac{1}{K_{I2}}}. \quad (149)$$

Solo se considera esta solución debido a que la otra alternativa corresponde al estado estacionario de la dinámica  $S_2$  en fase de inhibición en metanogénesis. Para calcular el estado estacionario de la dinámica  $X_1$  se usa la ecuación de  $S_1$  en (133) y la ecuación de  $\mu_1$  en (149). Por lo tanto, se obtiene.

$$X_1^* = \frac{1}{\alpha k_3} (S_{1in} - S_1^*). \quad (150)$$

Tomando las ecuaciones (133), (144), (145) y (150), obtenemos el siguiente valor para la dinámica  $X_2$ :

$$X_2^* = \frac{1}{\alpha k_3} \left( S_{2in} - S_2^* + \frac{k_2}{k_1} (S_{1in} - S_1^*) \right). \quad (151)$$

El valor para el flujo de metano en estado estacionario en fase no inhibitoria se obtiene directamente de las ecuaciones (140) y (145):

$$q_M^* = k_6 \alpha D X_2^*. \quad (152)$$

### Proceso de identificación

El modelo AM2 contempla la identificación de un total de 8 parámetros. Para este caso en particular, esta tarea se lleva a cabo mediante el uso de los datos experimentales de M. A. de la Rubia [11]. El problema de identificación es dividido en dos grupos, debido a la dificultad del modelamiento en los parámetros cinéticos, que usualmente genera gran incertidumbre [5]. Por lo tanto, el protocolo de identificación considera separar las variables en: parámetros cinéticos ( $\mu_{1max}$ ,  $K_{S1}$ ,  $\mu_{2max}$  y  $K_{S2}$ ), y coeficientes de rendimiento ( $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$  y  $k_6$ ).

#### • Parámetros cinéticos

El primer conjunto de parámetros a identificar son los cinéticos. Para llevarlo a cabo, se tomaron las ecuaciones (144) y (142). Luego de igualar el término  $\mu_1$  a ambos lados de la ecuación se obtuvo el siguiente resultado:

$$\frac{1}{D} = \frac{\alpha}{\mu_{1max}} + K_{S1} \frac{\alpha}{\mu_{1max}} \frac{1}{\bar{S}_1} \quad (153)$$

Como se observa en la ecuación (153), la estrategia consistió en llevar esta ecuación a la forma en la que se representa una recta de regresión  $y = ax + b$ . Por lo tanto, la variable dependiente es  $y = \frac{1}{D}$  y la variable independiente es  $x = \frac{1}{\bar{S}_1}$ . Esta ecuación relaciona los datos experimentales de las variables  $D$  y  $\bar{S}_1$  obtenidos en M. A. de

la Rubia [11]. El cálculo de los parámetros cinéticos de los microorganismos acidogénicos que se calculan en esta ecuación no se puede completar en su totalidad, debido a que los parámetros  $\alpha$  y  $\mu_{1max}$  no pueden calcularse por ser la pendiente de la ecuación de la recta  $a$  y la ordenada  $b$  respectivamente. Por consiguiente, se tomará el valor de  $\alpha = 1$  debido a que el reactor donde se llevó a cabo la experimentación es de mezcla perfecta.

La segunda relación, que permitirá obtener el resto de parámetros, se obtiene al combinar las ecuaciones (143) y (145), igualando el término  $\mu_2$  a ambos lados de la ecuación. La ecuación que se muestra a continuación representa una recta de la forma  $y = ax + b$ , con lo que se pretende resolver un problema de regresión.

$$\frac{1}{D} = \frac{\alpha}{\mu_{2max}} + K_{S2} \frac{\alpha}{\mu_{2max}} \frac{1}{\bar{S}_2} \quad (154)$$

La variable dependiente es  $y = \frac{1}{D}$  y la variable independiente  $x = \frac{1}{\bar{S}_2}$ . Esta ecuación relaciona los datos experimentales de las variables  $D$  y  $\bar{S}_2$  obtenidos en M. A. de la Rubia [11]. Los valores correspondientes de la pendiente  $a$  y el intercepto  $b$  son  $K_{S2} \frac{\alpha}{\mu_{2max}}$  y  $\frac{\alpha}{\mu_{2max}}$  respectivamente.

- **Coefficientes de rendimiento**

Para llevar a cabo la identificación de los coeficientes de rendimiento, se usaron las ecuaciones (151) y (152), en donde se igualó, a ambos lados, la dinámica  $X_2$ . A continuación, se muestra el resultado:

$$\bar{q}_M = D \frac{k_6}{k_3} \left( S_{2in} - \bar{S}_2 + \frac{k_2}{k_1} (S_{1in} - \bar{S}_1) \right). \quad (155)$$

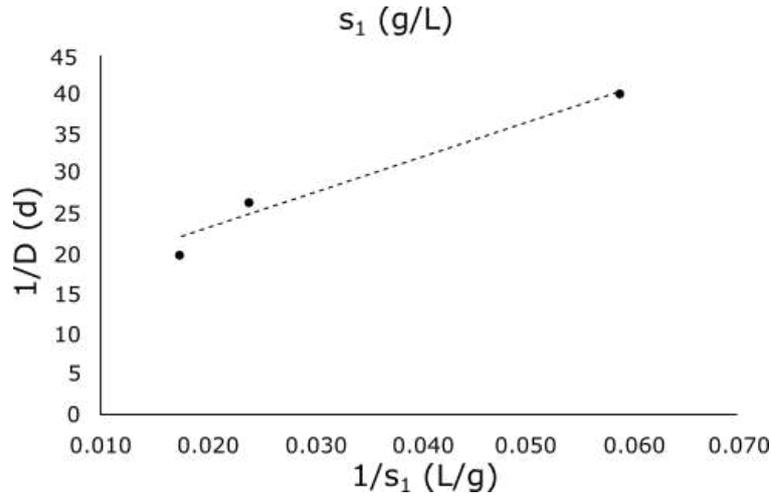
Como se observa en la anterior ecuación, la recta de regresión queda en función de las relaciones  $k_6/k_3$  y  $k_2/k_1$ . Se usa la prueba de laboratorio medición experimental de sólidos volátiles en suspensión (VSS), con el objetivo de obtener el valor individual de cada uno de los coeficientes. El valor de VSS en el modelo se define como el valor total de biomasa en el digestor, es decir, la sumatoria de los valores de  $X_1$  y  $X_2$ .

### Resultados de la identificación de parámetros

En las siguientes figuras se muestra el resultado de los cálculos realizados para las dos rectas de regresión. Para la Figura (31), la recta de regresión lineal calculada es la que se muestra a continuación.

$$Y_{S_1} = 440.82X_{S_1} + 14.449 \quad (156)$$

El coeficiente R-cuadrado, es la métrica que se usó para determinar el grado de ajuste del modelo de regresión lineal a los datos experimentales. Para



**Figura 31:** Recta de regresión entre  $1/S_1$  y  $1/D$ .

el caso de la Figura 31 el coeficiente tuvo un valor de  $R^2 = 0.956$ , lo cual permite concluir que el proceso de ajuste fue muy bueno.

Por comparación, el sistema de ecuaciones que se propone es el siguiente:

$$\frac{1}{D} = \frac{\alpha}{\mu_{1max}} + K_{S_1} \frac{\alpha}{\mu_{1max}} \frac{1}{\bar{S}_1}, \quad (157)$$

$$Y_{s_1} = aX_{S_1} + b. \quad (158)$$

Lo anterior implica que el valor de la variable  $b$  sea igual a:

$$b = \frac{\alpha}{\mu_{1max}} = 14.449. \quad (159)$$

Se toma el valor de  $\alpha = 0.5$  debido a que es el parámetro relacionado con el diseño del reactor. Por lo tanto, se puede calcular que:

$$\mu_{1max} = 0.035d^{-1}. \quad (160)$$

Finalmente, el término independiente se calcula de la siguiente manera:

$$a = K_{S_1} \frac{\alpha}{\mu_{1max}} = 440.82. \quad (161)$$

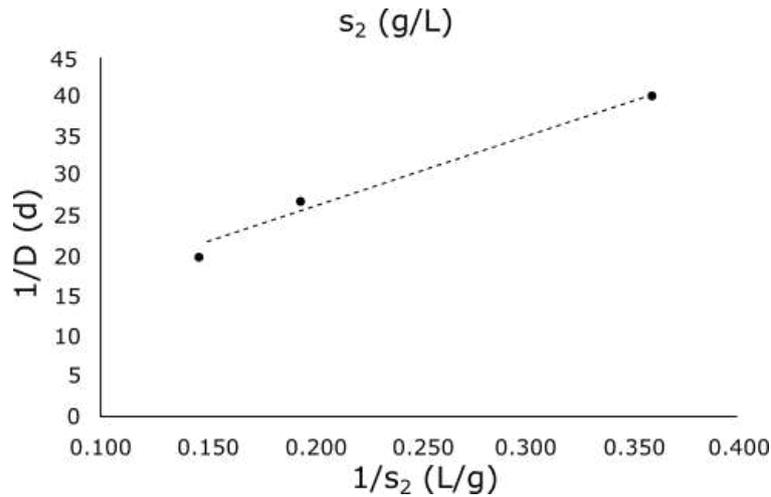
Por lo tanto, si reemplazamos en la anterior ecuación los valores de  $\mu_{1max}$  y  $\alpha$ , se obtiene el valor de  $K_{S_1} = 27.5g/L$ . Para el caso de la Figura 32, la recta de regresión lineal calculada se muestra a continuación.

$$\frac{1}{D} = \frac{\alpha}{\mu_{2max}} + K_{S_2} \frac{\alpha}{\mu_{2max}} \frac{1}{\bar{S}_2}, \quad (162)$$

$$Y_{s_2} = aX_{S_2} + b. \quad (163)$$

Lo anterior implica que el valor de la variable  $b$  sea igual a:

$$b = \frac{\alpha}{\mu_{2max}} = 8.4706, \quad (164)$$



**Figura 32:** Recta de regresión entre  $1/S_2$  y  $1/D$ .

Se toma el valor de  $\alpha = 0.5$  debido a que es el parámetro relacionado con el diseño del reactor. Por lo tanto, se puede calcular que:

$$\mu_{2_{max}} = 0.059d^{-1} \quad (165)$$

Finalmente, el término independiente se calcula de la siguiente manera:

$$a = K_{S_2} \frac{\alpha}{\mu_{2_{max}}} = 88.555 \quad (166)$$

Por lo tanto, si reemplazamos en la anterior ecuación los valores de  $\mu_{1_{max}}$  y  $\alpha$ , se obtiene el valor de  $K_{S_2} = 10.5g/L$ . La Tabla 10 a continuación muestra un resumen de los parámetros calculados.

**Tabla 10:** Valores parámetros cinéticos.

Parámetro	Valor	Unidades
$\mu_{1_{max}}$	0.035	$d^{-1}$
$K_{S_1}$	27.5	$g/L$
$\mu_{2_{max}}$	0.059	$d^{-1}$
$K_{S_2}$	10.5	$g/L$

De acuerdo con la revisión bibliográfica llevada a cabo por Abdelouahab Z. et al. [68], en la que se hace un resumen de los rangos de valores de los parámetros que han sido registrados por otros investigadores, se concluye que los valores encontrados en la anterior tabla se encuentra dentro de los límites permitidos.

Finalmente, se calcula el resto de los coeficientes. Las ecuaciones que deben ser usadas para realizar este procedimiento se mostraron en la anterior sección. El cálculo se debe llevar a cabo usando las relaciones  $\bar{q}_M$ ,  $D$ ,  $(S_{1_{in}} - \bar{S}_1)$  y  $(S_{2_{in}} - \bar{S}_2)$ . La tabla a continuación muestra los resultados luego de haber llevado a cabo el reemplazo de la información que se obtuvo directamente del experimento.

**Tabla 11:** Información experimental media para cada rango de SRT.

SRT	D	$\bar{q}_M$	$\bar{S}_{1in}$	$\bar{S}_1$	$S_{1in} - \bar{S}_1$	$S_{2in}$	$S_2$	$S_{2in} - \bar{S}_2$
	$(d^{-1})$	$(gL^{-1}d^{-1})$	$(gL^{-1})$	$(gL^{-1})$	$(gL^{-1})$	$(gL^{-1})$	$(gL^{-1})$	$(gL^{-1})$
40	0.050	36.20	67.01	56.63	10.38	25.66	7.71	17.95
27	0.037	29.15	62.94	41.37	21.57	24.26	5.15	19.10
15	0.025	20.98	53.53	17.02	36.51	22.56	2.78	19.78

A continuación, se muestran las relaciones obtenidas:

$$\frac{k_2}{k_1} = 0.0918 \quad (167)$$

$$\frac{k_6}{k_3} = 36.76 \quad (168)$$

El siguiente paso consiste en usar las anteriores ecuaciones, los radios de rendimiento, y calcular el valor de cada uno de ellos. Por lo tanto, se plantea la siguiente ecuación que establece una relación, a través de una variable  $v$ , que representa la relación entre bacterias acidogénicas respecto a la biomasa total  $VSS$ .

$$v = \frac{\bar{X}_1}{\bar{X}_1 + \bar{X}_2} \cong \frac{1}{\alpha k_1} \frac{S_{1in} - \bar{S}_1}{VSS}. \quad (169)$$

Si se asume que el valor de  $v$  puede mantener el mismo valor durante todo el tiempo de simulación, y si se asume que  $v = 0.2$  de acuerdo con Sánchez et al. [69], se calcula entonces el valor de  $k_1$  como:

$$k_1 = \frac{1}{\alpha v} \frac{S_{1in} - \bar{S}_1}{VSS}. \quad (170)$$

Para obtener el valor del parámetro  $k_3$ , se reemplazan las ecuaciones (150) y (151) en la ecuación (169), por lo que se obtiene:

$$v = \frac{\frac{1}{\alpha k_1} (S_{1in} - S_1^*)}{\frac{1}{\alpha k_1} (S_{1in} - S_1^*) + \frac{1}{\alpha k_3} \left( S_{2in} - S_2^* + \frac{k_2}{k_1} (S_{1in} - S_1^*) \right)}. \quad (171)$$

Finalmente, si se reemplaza el valor del parámetro  $k_3$  obtenemos la ecuación que sigue:

$$k_3 = k_1 \frac{v}{1-v} \left( \frac{S_{2in} - \bar{S}_2}{S_{1in} - \bar{S}_1} + \frac{k_2}{k_1} \right). \quad (172)$$

Luego de obtener el valor de  $k_3$  y  $k_1$ , el siguiente paso es calcular los valores de los parámetros  $k_2$  y  $k_6$ . La tabla 12 muestra el valor que finalmente fue obtenido de los parámetros cinéticos.

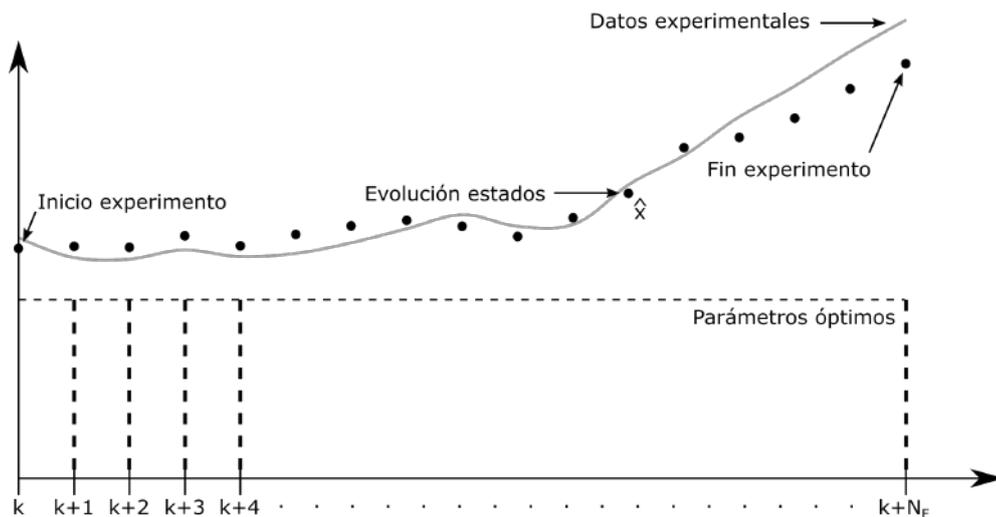
### Optimización paramétrica

Este método encuentra el valor de los parámetros a través de la solución de un problema de optimización cuyo objetivo es minimizar la diferencia entre los estados medidos experimentalmente y los estimados por el modelo matemático [14]. Por lo tanto, para llevar a cabo la implementación,

**Tabla 12:** Valores calculados de los parámetros cinéticos

Parámetro	Descripción	Valor
$k_1$	Constante de degradación de DQO	0.45
$k_2$	Constante de producción de AGV	0.04
$k_3$	Constante de consumo de AGV	0.22
$k_6$	Constante de producción de $CH_4$	7.84

es fundamental la selección de un modelo matemático que represente las dinámicas del proceso, que en este caso es el modelo AM2 modificado. Este modelo tiene nueve parámetros, nueve grados de libertad, que son los encargados de ajustar el modelo a los datos experimentales a lo largo del tiempo de experimentación. En la Figura (33) se muestra la manera en que es resuelto el problema de optimización para encontrar el valor de los parámetros óptimos. El tiempo de muestreo  $k$  hace referencia al momento en el que se da inicio al experimento. En ese momento comienza a resolverse el problema de ajuste. La evolución de los estados dependerá del valor de los parámetros que se han calculado y que son fijos durante todo el tiempo que duró el experimento, desde el día 1 ( $k + 1$ ), hasta el día 208 ( $k + N_F$ ). Como se observa en la figura, el objetivo es ajustar el modelo matemático, los valores de  $\hat{x}$ , que su dinámica está gobernada por el valor de los parámetros óptimos calculados, al valor de los datos experimentales, la línea continua en color gris. Los valores de las entradas al digestor en la experimentación son las mismas que se consideran para el modelo. En otras palabras, el valor de los parámetros calculados por el algoritmo de optimización debe satisfacer minimizar el valor experimental de los estados y el valor de los estados del modelo.



**Figura 33:** Optimización paramétrica en todo el tiempo de experimentación.

En la ecuación (173) a continuación, se formula el problema de optimización.

$$\begin{aligned}
 & \min_{p(k), \dots, p(k+N_F)} J(p(k), y(k)) \\
 & \text{s.t.} \\
 & x(k+1) = f(x(k), p(k)), \\
 & y(k) = g(x(k), u(k)), \\
 & y_{min} \leq y(k) \leq y_{max}, \forall k = 1, \dots, N_p, \\
 & p_{min} \leq u(k) \leq p_{max}, \forall k = 1, \dots, N_u
 \end{aligned} \tag{173}$$

donde la función  $J(u(k), y(k))$  representa la funcional de costo que contiene el criterio que se propone minimizar, la cual se encuentra en función de los parámetros óptimos a calcular  $p(k)$ , la función de salida  $y(k)$ , y los estados del modelo  $x(k)$ . La variable  $g(k)$  representa la señal de referencia que ingresa al modelo. Los valores de  $y_{min}$  y  $y_{max}$  son los límites operacionales superior e inferior a los que opera el sistema. Finalmente,  $p_{min}$  y  $p_{max}$  son los valores de los límites inferior y superior de los parámetros óptimos que deben ser calculados, o el espacio de búsqueda factible de la solución. Para este caso  $p(k) \in \{\mu_{1max}, K_{SI}, \mu_{2max}, K_{S2}, k_1, k_2, k_3, k_6\}$ .

$$J(u(k), y(k)) = norm((x_{mod}(k) - x_e)^2) \tag{174}$$

La ecuación (174) muestra la funcional de costo que se ha propuesto. En ella se establece la norma de la diferencia, elevada al cuadrado, entre los valores de las dinámicas del modelo mediante simulación  $x(k)$  y el valor de las dinámicas obtenidas mediante medición directa en la experimentación  $x_e(k)$ .

### Selección método y formalización del problema de optimización

Primero, es necesario seleccionar las variables que han sido medidas durante el experimento y sean requeridas por el modelo AM2 modificado. En la tabla a continuación se muestran las variables que fueron seleccionadas para plantear el problema de optimización y su nomenclatura en el modelo.

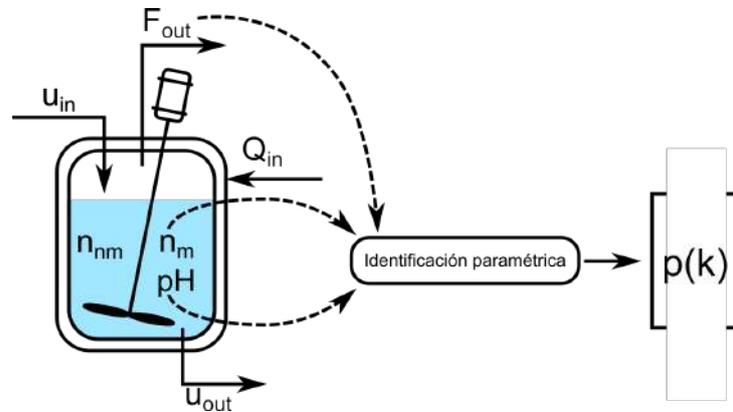
**Tabla 13:** Variables seleccionadas para ajustar el modelo matemático al experimento mediante los parámetros a estimar.

	Variables							
	$COD_{in}$	$VFA_{in}$	$COD$	$VFA$	$Z$	$pH$	$q_M$	$D$
Variable en modelo	$S_{1in}$	$S_{2in}$	$S_1$	$S_2$	$Z$	$pH$	$q_M$	$D$

De acuerdo con la anterior tabla, las variables  $COD_{in}$ ,  $VFA_{in}$ ,  $COD$ ,  $VFA$ ,  $Z$ ,  $pH$ ,  $q_M$  y  $D$  corresponden en el modelo con la demanda química de oxígeno en el influente  $S_{1in}$ , los ácidos grasos volátiles en el influente  $S_{2in}$ , la demanda química de oxígeno en el efluente  $S_1$ , los ácidos volátiles grasos en el efluente  $S_2$ , la alcalinidad en el efluente  $Z$ , el valor del  $pH$  en el efluente,

el flujo molar del metano  $q_M$  y la tasa de dilución  $D$ . La figura a continuación muestra el esquema que se planteó para hacer el planteamiento del problema de optimización paramétrica.

Como se observa en la figura 34, el vector  $u_{in} = \{S_{1in}, S_{2in}, D\}$  contiene el valor de la información de las entradas medidas.  $n_m = \{S_1, S_2, Z\}$  corresponde con el vector que contiene la información de los estados medidos del sistema.  $F_{out} = \{CH_4\}$ , contiene la información del valor de la cantidad de metano producido. Además, el valor del  $pH$  también es usado para condicionar el proceso de identificación, ya que esta variable influye en la producción del biogás al estar relacionada con el estado metabólico de las bacterias metanogénicas.  $n_{nm} = \{X_1, X_2, C\}$  corresponde con el vector que contiene la información de los estados no medidos del sistema.  $u_{out} = \{n_{nm}, n_m, pH\}$  contiene la información del efluente. Finalmente,  $Q_{in}$  corresponde con el valor de la energía (que para este caso no se tiene en cuenta para propósitos de modelado) que se necesita para mantener al reactor en la región de operación termofílica. Toda la información anterior es la que usa el algoritmo de optimización (recuadro *Identificación paramétrica* en la figura) para calcular los parámetros óptimos. En la sección a continuación se explica cómo se plantea el problema de optimización con el enfoque desde el reactor de digestión anaerobia.  $p(k)$  hace referencia al valor encontrado de los parámetros.



**Figura 34:** Arquitectura del algoritmo de optimización paramétrica en el reactor de digestión anaerobia.

### Planteamiento del problema de optimización

Para ajustar el modelo a los datos experimentales, se requiere solucionar un problema de optimización que minimice la diferencia entre los estados  $n_m$ , el valor de  $CH_4$  y el valor de  $pH$  que han sido medidos a través de la experimentación y estimados (por el modelo). El modelo matemático usado es el que fue descrito en el anterior capítulo. Así entonces, la formulación del problema de optimización se muestra a continuación.

$$\min_{u(k)} J(n_m(k), u(k)) \quad (175)$$

s. t.

$$\begin{aligned} n_m(k+1) &= f(n_m(k), u(k)), \\ n_{nm}(k+1) &= f(n_{nm}(k), u(k)), \\ 0 \leq u(k) &\leq p_{max}, \forall k = 1, \dots, t_f \end{aligned} \quad (176)$$

$J(n_m(k), u(k))$  representa la funcional de costo que se propone minimizar, esta está dada por.

$$\begin{aligned} J(n_m(k), u(k)) = &norm \left( (n_m^{mod}(k) - n_m^e(k))^2 + \right. \\ &\left. (pH^{mod}(k) - pH^e(k))^2 + (q_M^{mod}(k) - q_M^e(k))^2 \right) \end{aligned} \quad (177)$$

La anterior ecuación representa el error cuadrático medio entre los datos experimentales ( $n_m^e(k)$ ,  $pH^e(k)$  y  $q_M^e(k)$ ) y el modelo ( $n_m^{mod}(k)$ ,  $pH^{mod}(k)$  y  $q_M^{mod}(k)$ ). Los parámetros de ajuste están contenidos en el vector  $u(k) = \{\mu_{1max}, \mu_{2max}, K_{S1}, K_{S2}, k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6\}$ , cuyos términos corresponden a la máxima tasa de crecimiento de bacterias acidogénicas, la máxima tasa de crecimiento de bacterias metanogénicas, la constante de saturación media para  $S_1$ , la constante de saturación media para  $S_2$ , el coeficiente de degradación de sustrato, el coeficiente de producción de VFA, el coeficiente de consumo de VFA, el coeficiente de producción de  $CO_2$ , el coeficiente de producción de  $CO_2$  y el coeficiente de producción de  $CH_4$  respectivamente.

## 4.5 Implementación

Finalmente, en esta sección se muestran los resultados del ajuste del modelo matemático que fue logrado al aplicar el algoritmo de optimización paramétrica. En principio se explica el planteamiento de la estructura de identificación de acuerdo con la naturaleza del modelo matemático. Luego, se muestra la comparación de los datos reales medidos en la experimentación y los datos obtenidos por el ajuste del modelo.

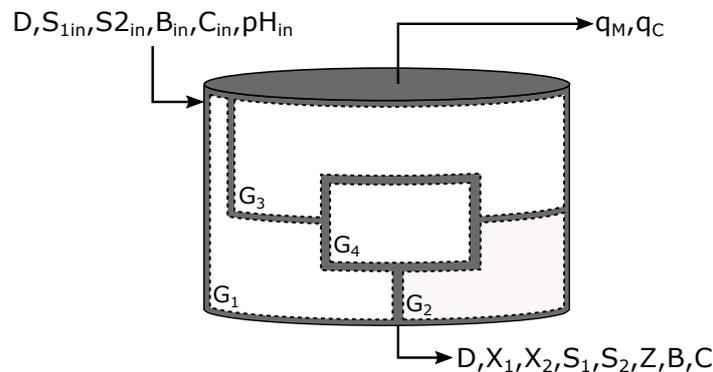
### 4.5.1 Identificación de reactor anaerobio en ambiente real

La estructura en bloques que tiene el modelo permite realizar un análisis sencillo y por separado del sistema. En esta sección se utiliza esta ventaja estructural para discutir la identificabilidad de los parámetros encontrados.

En el anterior capítulo se observa que las ecuaciones (131) y (134) se pueden agrupar en un subsistema por separado. Lo anterior significa que los valores de los estados  $S_1$  y  $X_1$  no son influenciadas por otras variables y por lo tanto, por los parámetros asociados a estas ecuaciones. El sistema corresponde con un modelo clásico de Chemostat, con una cinética de reacción

tipo Monod y con un coeficiente de tasa de mortalidad  $k_d = (\alpha - 1)D$ . Si se consideran condiciones en el que el influente es constante, se determina que existen dos situaciones de equilibrio. Para valores apropiados en el valor de  $D$ , existe una situación de equilibrio estable y una situación de equilibrio inestable, en el que se presenta un lavado del reactor. Por otro lado, se observa en la ecuación (133) que la dinámica de alcalinidad  $Z$  es independiente del resto de ecuaciones. Debido a que esta ecuación es lineal, tiene un solo estado estacionario. Como siempre  $D$  es positivo, entonces se concluye que la alcalinidad total  $Z$  es estable.

El sistema compuesto por las ecuaciones (131), (134) y (132), (135) se puede considerar independiente. Para el caso general, existen tres puntos de equilibrio. El primero es cuando el reactor anaerobio trabaja en un punto de operación estable dentro de los límites operacionales, el segundo es cuando el sistema se encuentra en un punto de operación de inestabilidad y el tercero se presenta cuando el sistema se encuentra en un punto de estabilidad trivial, cuando hay un lavado del reactor de tal manera que  $X_1 = 0$  y  $S_1 = S_{1in}$ . Una vez que el sistema independiente compuesto por las ecuaciones (131) y (134) converge, las dinámicas de las ecuaciones (132) y (135) lo harán de la misma manera a uno de los puntos de operación estable. De la misma manera, la ecuación de la dinámica (136) convergerá en ese mismo instante. En la Figura 35 se observa la división que se ha llevado a cabo del sistema homogéneo de digestión anaerobia de acuerdo con las dinámicas consideradas. Las cuatro secciones se han clasificado por grupos de ecuaciones;  $G_1$ ,  $G_2$ ,  $G_3$  y  $G_4$  respectivamente. El Grupo 1 es un subsistema dentro de la reacción homogénea compuesto por las dinámicas  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $S_1$ , y  $S_2$ . A este grupo ingresan directamente la entrada manipulada, la tasas de dilución  $D$ , y las entradas no manipuladas  $S_{1in}$ ,  $S_{2in}$ ,  $B_{in}$ ,  $C_{in}$ , y  $pH_{in}$ , que son los valores en el influente de la demanda química de oxígeno, los ácidos volátiles grasos, el valor del bicarbonato, el carbono inorgánico y el valor del nivel de  $pH$  respectivamente.



**Figura 35:** Cuatro grupos para el sistema homogéneo de reacción de digestión anaerobia.

El Grupo 2 en la Figura 35 corresponde con las dinámicas  $C$  y  $Z$  que son el carbono inorgánico y la alcalinidad. En el Grupo 3 en la parte superior de

la figura contiene la información del flujo de biogás producido; el metano y el dióxido de carbono. Finalmente, el Grupo 4 contiene la información del nivel de  $pH$  de la mezcla homogénea. En la sección a continuación se muestran los resultados de los ajustes que se lograron.

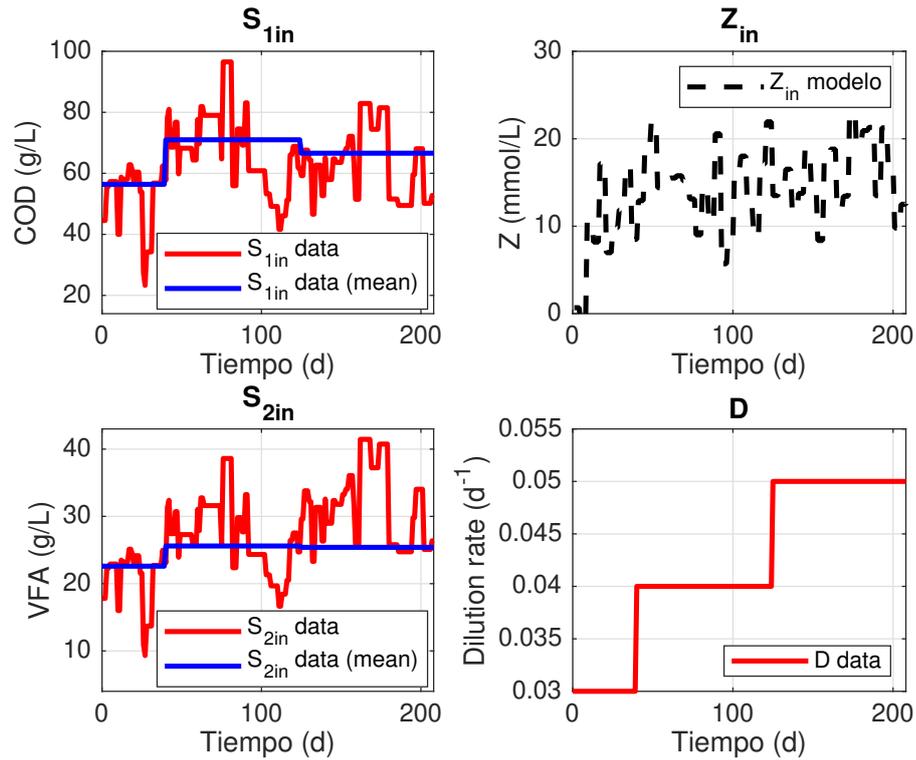
### 4.5.2 Resultados

En esta sección se muestran los resultados que se obtuvieron luego de resolver dos problemas de optimización que ajustaron los parámetros del modelo seleccionados resolviendo un problema de optimización. Estos resultados fueron obtenidos gracias al uso del *toolbox* de optimización de MATLAB®.

#### Optimización usando algoritmos genéticos

Los algoritmos genéticos imitan la manera en que los seres vivos se adaptan y evolucionan influenciados por el medio ambiente y las características genéticas de sus antepasados. Con las nuevas generaciones, los algoritmos genéticos simulan la herencia de los cromosomas de la generación predecesora a través de operaciones matemáticas como reemplazos y elección. Estos algoritmos metaheurísticos intentan encontrar un resultado óptimo global dentro de una región de búsqueda basada en un conjunto de reglas heurísticas. Es necesario anotar que estas reglas se basan en una exploración aleatoria, por lo tanto, el tiempo de convergencia a la solución final depende de la cantidad de iteraciones que se lleven a cabo hasta encontrar la solución óptima.

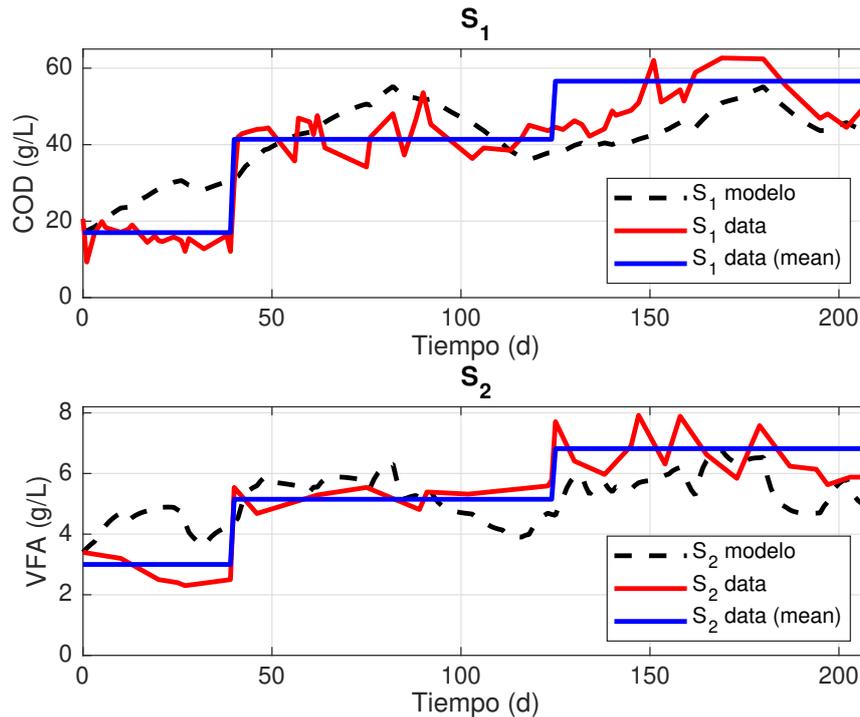
En la Figura 36 se muestran los datos que fueron usados para asignar el valor a las entradas  $S_{1in}$ ,  $S_{2in}$ ,  $Z_{in}$  y  $D$  en el proceso de identificación. Para el caso de  $S_{1in}$ , la línea en color rojo muestra el valor que se registró para la variable demanda química de oxígeno en el influente. Para efectos de simulación, se consideró un valor constante, la línea de color azul. Se registraron tres cambios, cada uno de ellos en el momento en que el valor de la variable  $D$  cambió. De igual manera, se llevó a cabo la misma suposición para el caso de la variable  $S_{2in}$ . Además, se muestran los datos que se usaron para la variable  $D$ . Finalmente, los datos que se muestran de  $Z_{in}$  son el primer conjunto de resultados que entregó el algoritmo de optimización paramétrica, esto debido a que los datos de  $Z_{in}$  no fueron medidos en el trabajo llevado a cabo por M.A. de la Rubia [11]. Por lo tanto, se decidió hacer el cálculo de los mismos usando las condiciones de operación del resto de variables medidas. Cabe hacerse notar que la única condición que se asumió fue que el valor de la variable se mantuviera fija durante un periodo de tiempo de cuatro días, simulando que la variable se actualizaba por mediciones llevadas a cabo en ese mismo periodo de tiempo. La Figura 37 muestra el resultado del ajuste de parámetros que se logró en el modelo matemático AM2 modificado para los estados  $S_1$  y  $S_2$ , la demanda química de oxígeno y los ácidos volátiles grasos dentro del reactor respectivamente.



**Figura 36:** Entradas medidas o estimadas en el reactor de digestión anaerobia.

En la Figura 37, la línea en color rojo representa los datos experimentales y la línea en color azul es el valor promedio de los anteriores datos para cada franja de tiempo en el que la tasa de dilución cambió. Esta línea se trazó solamente para conocer cuál era el momento en el que la variable podría converger a un estado estacionario. Para los dos casos, es claro el momento en el que el valor de las entradas cambia y el sistema inmediatamente entra en un estado transitorio. La línea en color negro discontinua es el resultado del mejor ajuste logrado por el algoritmo de optimización paramétrica. Se observa, tanto en el valor de  $S_1$  y  $S_2$ , que la tendencia de las líneas discontinuas en color negro sigue a los datos experimentales.

Por otro lado, la Figura 38 muestra con líneas discontinuas en color negro la manera en que evolucionaron las concentraciones de bacterias acidogénicas y metanogénicas de acuerdo con los valores de las entradas y el resultado de la identificación de parámetros. Son evidentes los cambios en el valor de la concentración de bacterias  $X_1$  de acuerdo con la disponibilidad de sustrato  $S_1$ , sin embargo, hay una mayor correspondencia entre los valores de  $VFA$  registrados y el valor en tendencia continua de crecimiento en el valor de la concentración de bacterias metanogénicas  $X_2$ . Con respecto a la evolución de la dinámica de alcalinidad  $Z$ , en la Figura 40 se muestra que el ajuste del modelo a los datos experimentales tuvo un muy buen desempeño, esto es, tanto la tendencia como la cercanía entre las dos rectas determinaron un buen resultado.



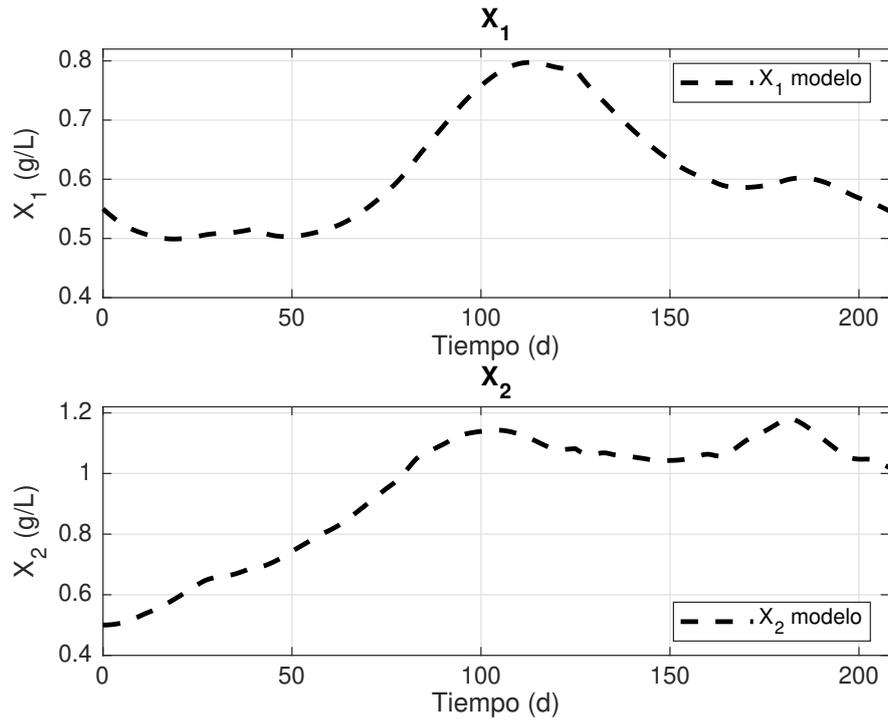
**Figura 37:** Ajuste del modelo a los datos de concentración de sustratos. Demanda química de oxígeno (DQO); y ácidos grasos volátiles (VFA).

Finalmente, para el caso de la variable  $pH$  también se logró un muy buen resultado, aunque hay una diferencia visual considerable, no deja de ser solo un tema de escala, sobre todo por la diferencia de valores que se presenta en el inicio del experimento entre el valor experimental y estimado. Este error al inicio se debió a las condiciones iniciales dentro del algoritmo de optimización paramétrica.

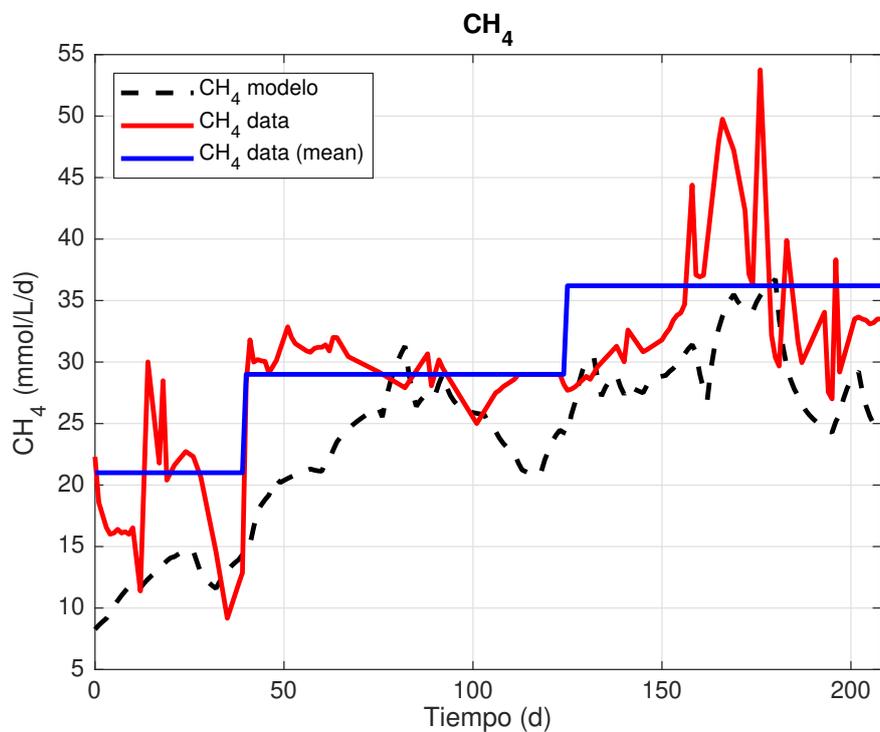
En la Figura 39 se muestra cómo los valores de los parámetros encontrados lograron un ajuste entre los datos experimentales y el modelo matemático para la producción de metano. La línea discontinua en color negro captura muy bien las variaciones de la producción de metano, manteniendo un buen desempeño en los ajustes en las otras variables que se observan en las anteriores figuras. El comportamiento del metano es correspondiente con la concentración de población de bacterias metanogénicas y la cantidad de sustrato presente en la mezcla homogénea durante todo el tiempo de experimentación.

### Método de optimización pattern search usando step-ahead

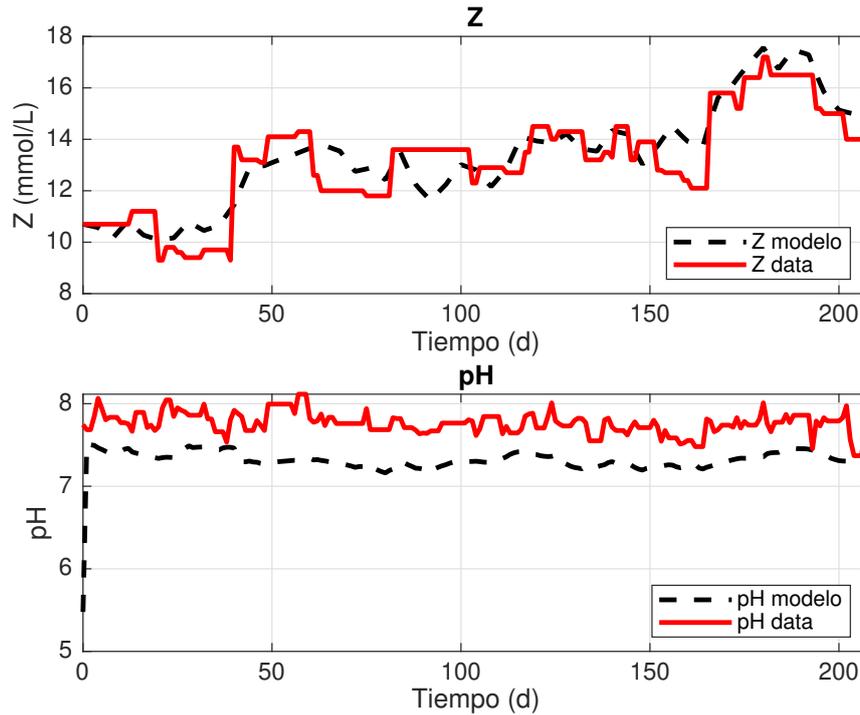
En esta sección se usa otro método de estimación de parámetros, con el fin de mejorar el ajuste del modelo a los datos experimentales. La técnica step-ahead se usa en aquellos casos en los que el modelo es usado para la predicción de las dinámicas de un sistema. Con el fin de explicar cómo funciona el método, considere la Figura 41, en donde si suponemos que la simulación comienza en el tiempo  $X_0$ , el algoritmo hace una predicción del



**Figura 38:** Ajuste del modelo a los datos de concentración de bacterias acidogénicas,  $X_1$ ; y concentración de arqueas metanogénicas,  $X_2$ .

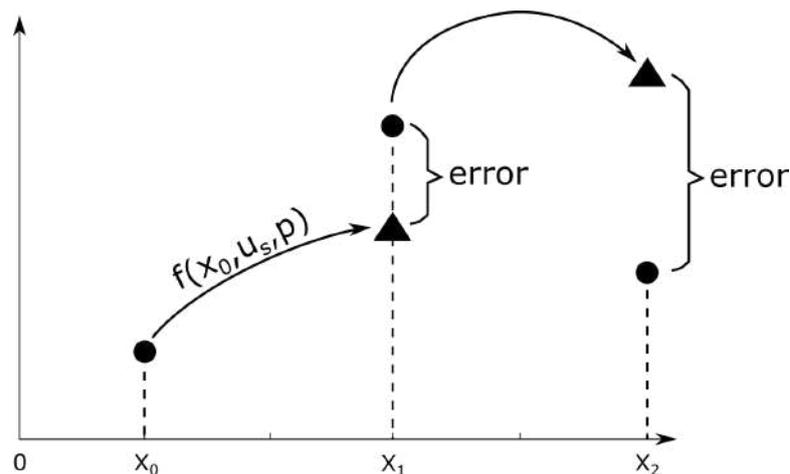


**Figura 39:** Ajuste del modelo a los datos de producción de metano  $CH_4$ .



**Figura 40:** Ajuste del modelo a los datos de alcalinidad total  $Z$  y nivel de  $pH$ .

modelo un paso hacia adelante, obteniendo el dato del siguiente día (punto representado por el triángulo en color negro  $\blacktriangle$ ). Esta diferencia representa el error que existe entre el modelo ajustado y los datos experimentales.



**Figura 41:** Funcionamiento del algoritmo step-ahead.

Para llevar a cabo esta predicción, se requiere conocer el valor de la condición inicial  $x_0$ , la información de todas las entradas  $u_s$  al reactor y el valor de los parámetros. En el siguiente paso, para realizar una nueva predicción un paso hacia adelante, el algoritmo actualiza la condición inicial que debería ser el

▲ al punto donde se encuentra el ●, que corresponde al dato del experimento que fue medido en ese momento. Esta estrategia permite relativizar el error, ya que se corrige la desviación en el valor de la predicción. Al final, se obtiene un vector que contiene el error acumulado para cada uno de los días en los que se tomó información en el proceso experimental, tal y como se muestra a continuación.

$$E = [error_1, error_2, \dots, error_n] \quad (178)$$

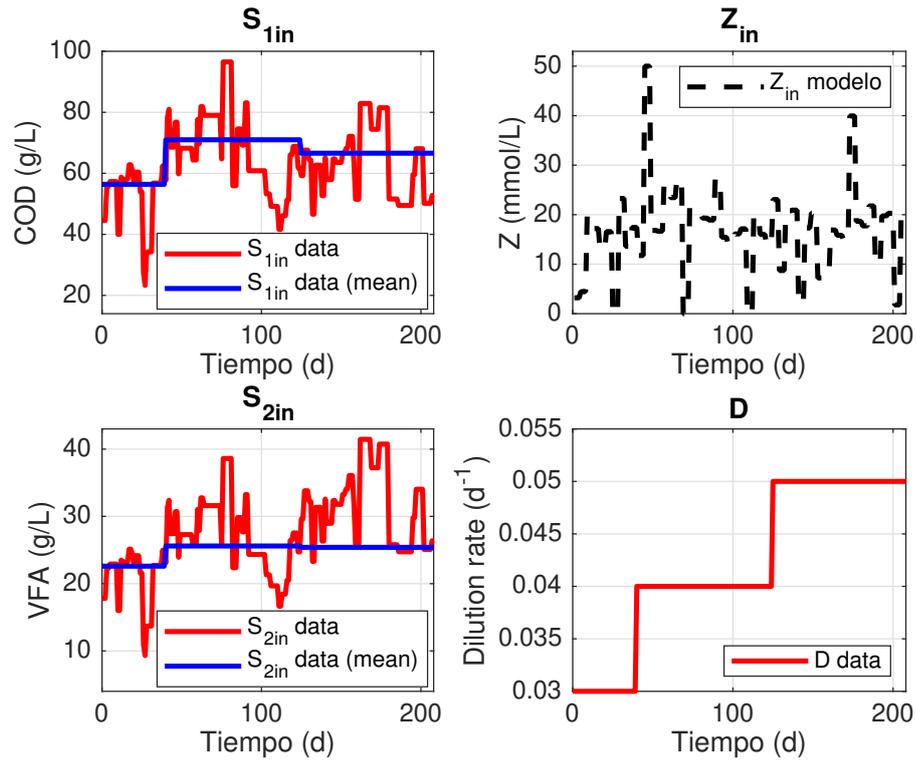
Donde  $n$  representa el número total de días que duró el experimento. El objetivo del problema de optimización cambia, pero las restricciones siguen siendo las mismas. La nueva formulación del problema de optimización se muestra a continuación.

$$\begin{aligned} & \min_{u(k)} E & (179) \\ \text{s.t.} & & \\ & n_m(k+1) = f(n_m(k), u(k)), & \\ & n_{nm}(k+1) = f(n_{nm}(k), u(k)), & \\ & 0 \leq u(k) \leq p_{max}, \forall k = 1, \dots, t_f & \end{aligned} \quad (180)$$

La Figura 42 a continuación muestra los datos que fueron usados para asignar el valor a las entradas  $S_{1in}$ ,  $S_{2in}$ ,  $Z_{in}$  y  $D$  en el proceso de identificación. Los datos de  $S_{1in}$ ,  $S_{2in}$  y  $D$  son exactamente los mismos que se usaron para resolver el anterior algoritmo de optimización. Finalmente, los datos de la variable  $Z_{in}$  no fueron medidos en el trabajo llevado a cabo por M.A. de la Rubia [11], por lo tanto, como ya fue explicado, se decidió calcularlos usando las condiciones de operación del resto de variables medidas y asumiendo que se mantenían durante un periodo de tiempo de cuatro días. Hubo mucha mayor variabilidad en los valores calculados por  $Z_{in}$ , sin embargo, el ajuste del modelo a los datos fue mucho mejor.

Para el caso de la Figura 43, se observa que el algoritmo propuesto en esta sección entrega unos resultados mucho mejores. El ajuste entre la línea discontinua negra y la línea roja que contiene la información de los datos experimentales es muy estrecha. La cercanía hace que el modelo sea casi que una representación de los datos tomados en el experimento.

En la Figura 44 se muestran los resultados que se obtuvieron del comportamiento que finalmente provino de la concentración de bacterias durante todo el tiempo de experimentación. El valor de la concentración de bacterias acidogénicas cae asintóticamente a cero desde su condición inicial. Sin embargo, para el caso de la concentración de las bacterias metanogénicas, el valor de  $X_2$  se incrementa progresivamente hasta alcanzar su valor máximo para luego regularse. De acuerdo con la figura, la concentración de bacterias metanogénicas es suficiente para producir la cantidad de metano que se muestra en la Figura 46, ya que al final del periodo de tiempo la producción aumenta considerablemente. De acuerdo con la información suministrada por el trabajo realizado por M.A. de la Rubia [11], sí se cuantificó de la



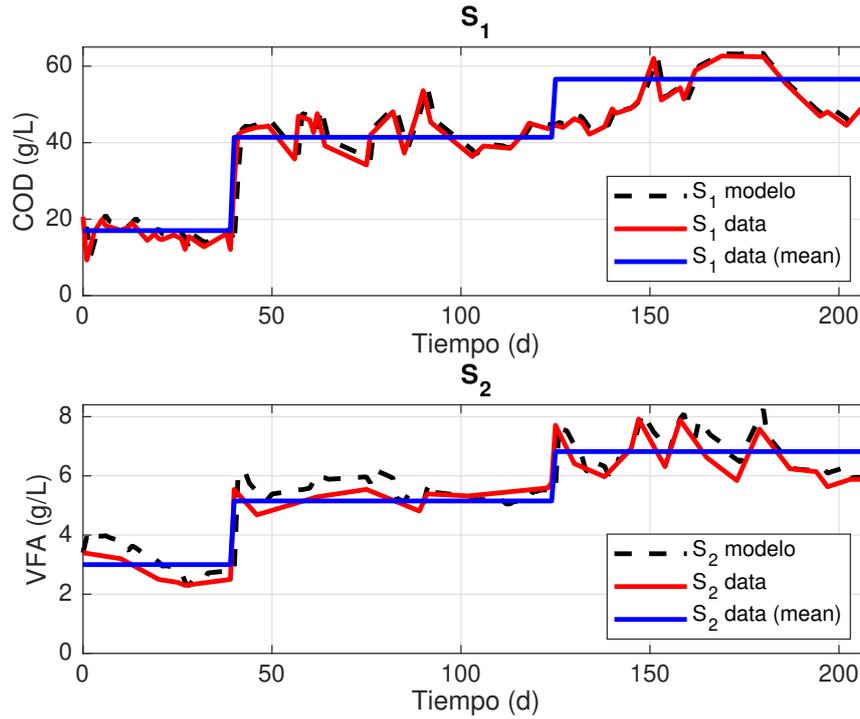
**Figura 42:** Entradas para medidas o estimadas para el sistema de digestión anaerobia.

concentración de bacterias metanogénicas al final de cada periodo. Esto fue posible utilizando la técnica de conteo de autofluorescencia por microscopio, que se pudo utilizar debido a que las bacterias metanogénicas se pueden excitar (inducir) con rayos UV. Al contrastar la información del artículo con los resultados obtenidos, se confirma la tendencia ascendente. En la Tabla 14 a continuación se muestra la concentración de bacterias metanogénicas y el incremento en cada una de las etapas SRT 20, 27 y 40 para todo el experimento. La primera columna muestra los valores promedio de SRT que se obtuvieron.

**Tabla 14:** Concentración de bacterias metanogénicas (células/mL) e incremento microbiano

SRT	Concentración (cell/mL)	Incremento
22.09	$4.06 \times 10^9$	$2.50 \times 10^9$
36.89	$4.50 \times 10^9$	$4.40 \times 10^8$
55.79	$5.30 \times 10^9$	$8.00 \times 10^8$

Por otro lado, la Figura 45 muestra los resultados que fueron obtenidos del ajuste que se logró para la alcalinidad  $Z$  y para el nivel de  $pH$ . Como se observa, el ajuste que se logró para la variable alcalinidad  $Z$  es mucho mejor que el que se logró con la propuesta de algoritmos genéticos de la anterior sección. La línea discontinua en color negro y la línea roja que contiene la



**Figura 43:** Ajuste del modelo a los datos de concentración de sustratos. Demanda química de oxígeno (DQO),  $S_1$ ; y ácidos grasos volátiles (VFA),  $S_2$ .

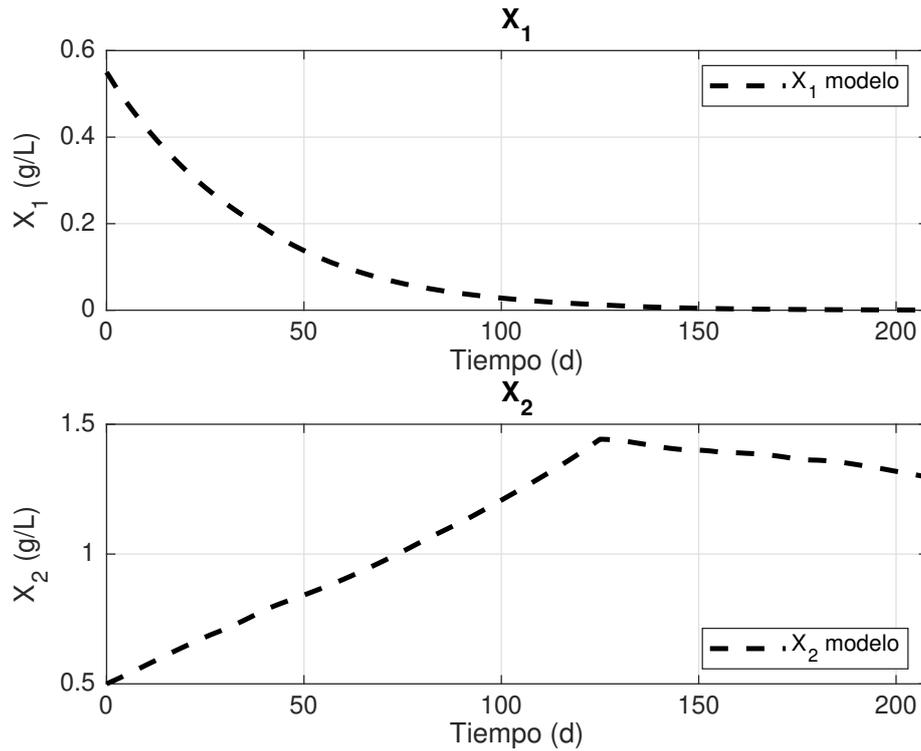
información de los datos experimentales son muy similares. Por su parte, el ajuste del  $pH$  también mejoró.

La última figura muestra el resultado que se obtuvo de ajustar el modelo a los datos experimentales obtenidos por la medición de la cantidad de metano producido por el reactor. El ajuste del modelo sigue la tendencia entregada por los datos experimentales.

En la Tabla 15 se muestran los valores de los 13 parámetros que fueron seleccionados luego de llevar a cabo la solución al problema de optimización usando step-ahead.

Finalmente, en la Tabla 16 se muestra la mejora en el ajuste que se logró entre el modelo y los datos experimentales que se obtuvo por el uso del algoritmo step-ahead (SA). La ecuación a continuación muestra el índice de desempeño que se usó para hacer la evaluación de la simulación.

$$\% \text{ Mejora error relativo} = 100 - \frac{100 \sum_{k=1}^{208} |S_1(k)^{sa} - S_1(k)^{exp}|}{\sum_{k=1}^{208} |S_1(k)^{ga} - S_1(k)^{exp}|} \quad (181)$$

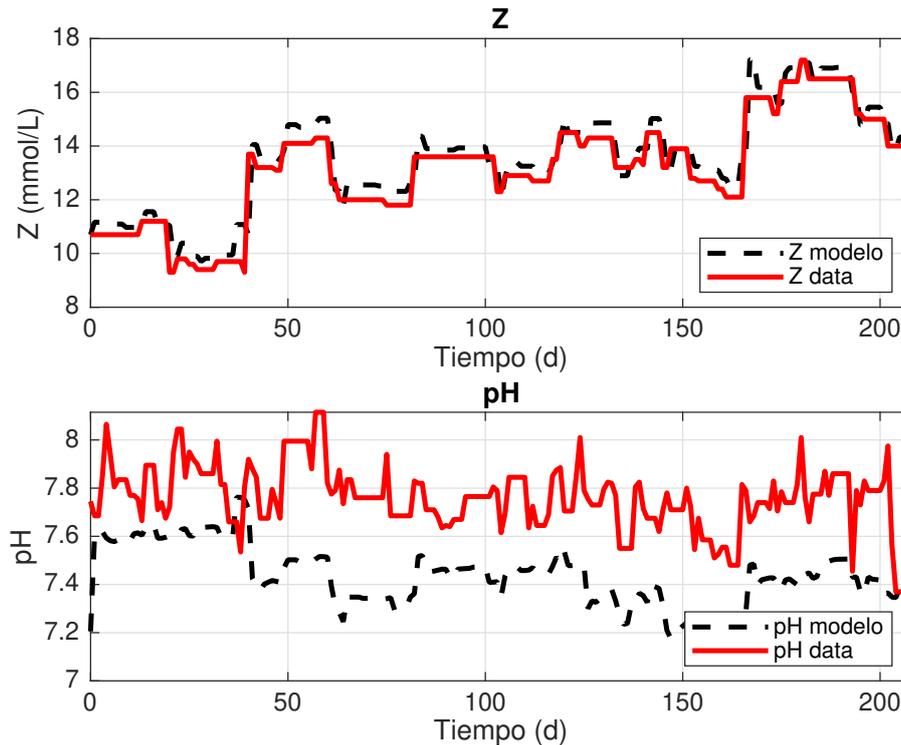


**Figura 44:** Ajuste del modelo a los datos de concentración de bacterias acidogénicas,  $X_1$ ; y concentración de arqueas metanogénicas,  $X_2$ .

**Tabla 15:** Valores de los parámetros seleccionados.

Parámetro	Valor		Unidad
	GA	SA	
$\mu_{1max}$	0.26	0.06	$d^{-1}$
$\mu_{2max}$	1.52	0.05	$d^{-1}$
$K_{S_1}$	213.89	298.03	$g/L$
$K_{S_2}$	168.76	1.08	$mmol/L$
$k_1$	29.34	$1.34 \times 10^{-6}$	$\square$
$k_2$	31.14	216.80	$mmol/g$
$k_3$	40.81	14.23	$mmol/g$
$k_4$	36.61	$8.58 \times 10^{-7}$	$mmol/g$
$k_5$	43.21	$1.14 \times 10^{-6}$	$mmol/g$
$k_6$	549.99	550.00	$mmol/g$
$K_{Z_1}$	0.68	3.21	$mmol/L$
$K_{Z_2}$	1.28	4.45	$mmol/L$
$Z_{in}$	$V_{Z_{in}}$	19.66	$mmol/L$

La ecuación anterior fue calculada para las variables  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $Z$ ,  $pH$  y  $CH_4$ . En el caso de la variable  $S_1$ , el porcentaje de mejora luego de usar el algoritmo step ahead fue de un 78.7%. Al comparar los resultados entre las figuras que contienen los resultados de los algoritmos genéticos y step ahead, se observa claramente que el porcentaje de mejora es correspondiente. Una



**Figura 45:** Ajuste del modelo a los datos de alcalinidad total  $Z$  y nivel de  $pH$ .

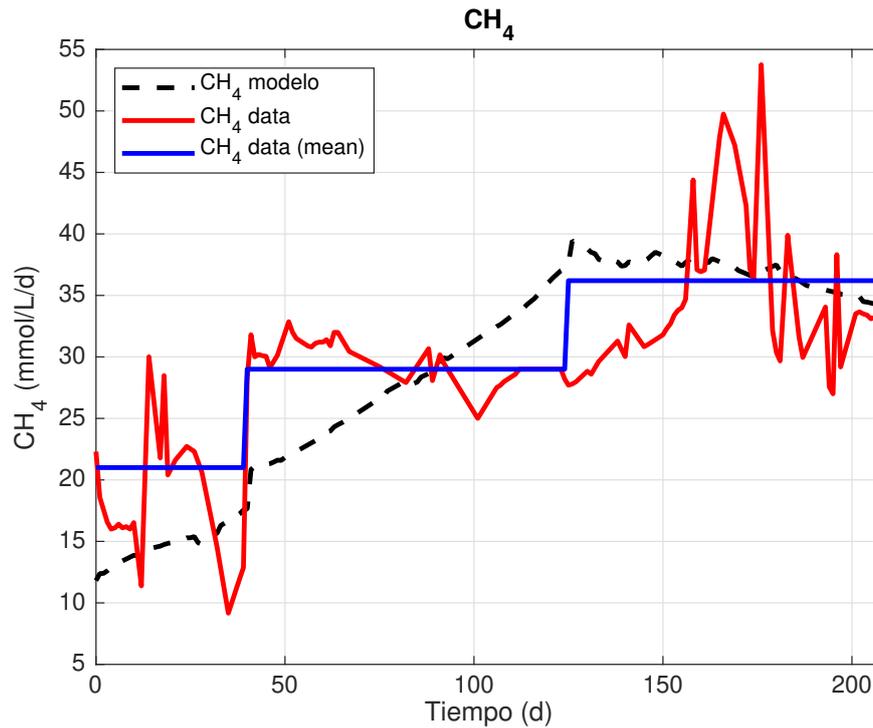
mejora de proporciones similares se logró al evaluar la variable  $S_2$ . El indicador, % mejora error relativo, fue de un 60 %. Es índice Se redujo para las variables  $Z$  y  $pH$ , con valores de 38.6 y 25.5 respectivamente. El valor en el índice para la variable  $CH_4$  fue el menor de todos, un 7.7%. Sin embargo, se sigue registrando mejoría. En general, el uso del algoritmo step ahead trajo consigo una mejora sustancial en el ajuste del modelo a los datos experimentales, por lo que las posteriores etapas de diseño del sistema de monitoreo y control van a dar mejores resultados.

**Tabla 16:** Cuantificación, ajuste de modelo a datos experimentales.

Variable	$S_1$	$S_2$	$Z$	$pH$	$CH_4$
% Mejora error relativo	78.7	60.5	38.6	25.5	7.7

## 4.6 Resumen

En este capítulo se trabajó con los datos experimentales que fueron tomados en un reactor de digestión anaerobia durante alrededor de un año de operaciones. Esta información fue clasificada, se hizo un tratamiento de los datos, porque del total de mediciones fueron tomadas se seleccionaron las más relevantes para el uso del modelo AM2 modificado. Se documentaron las pruebas de laboratorio que fueron realizadas durante una estancia por



**Figura 46:** Ajuste del modelo a los datos de producción de metano  $CH_4$  y nivel de  $pH$ .

estudios en el laboratorio de bioprocesos en la Universidad Autónoma de Madrid. El objetivo fue aprender a realizar la toma de muestras e información, usando sensores y procedimientos de laboratorio. Luego se explicaron los métodos que habitualmente se encuentran en la literatura para realizar estos procedimientos de ajuste de datos experimentales al modelo matemático. Se usó una métrica para cuantificar la calidad en el ajuste logrado. Se valoraron dos algoritmos basados en optimización, el primero de ellos fue usado como referencia; este demostró tener una gran capacidad para ajustar el modelo a los datos experimentales. Sin embargo, el uso del algoritmo step ahead mostró mejores resultados. En la tabla 16 se muestra el valor del porcentaje en el que el algoritmo mejora el ajuste con respecto a la anterior algoritmo. Los cambios logrados son sustanciales.



---

## 5 Monitorización y control en biodigestores

La información reportada en la literatura, tanto para estudios académicos como para implementaciones llevadas a cabo en la industria, apunta a que la mayoría de las aplicaciones con biorreactores tienen como objetivo el regular el valor del pH y la temperatura. El objetivo es, por lo tanto, gestionar la operación de estos sistemas, es decir, producir metano para su aprovechamiento y reducir la cantidad de contaminantes presentes en el efluente, evitando siempre que la acción de los microorganismos lleve el sistema a estados de inhibición o pérdida de biomasa productiva en un eventual lavado del reactor [34, 5, 40]. En este sentido, no hay duda de que la implementación de un sistema automático de control no solo mejora la producción de biogás y la calidad de los contaminantes que salen por el efluente, sino que también que se hace viable el uso masivo de los biodigestores a nivel industrial. Si lo anterior se lograra llevar a cabo, el sistema sería autosuficiente, reduciendo la cantidad del personal especializado necesario para supervisar la operación del sistema [14]. En este sentido, este trabajo tiene como objetivo solucionar los problemas que impiden hacer un escalado de la tecnología. La comprobación se realizará a través del uso de simulaciones usando datos de casos reales [11].

Las secciones contenidas en este capítulo tienen los elementos que permiten ensamblar la estructura de monitorización y control para un proceso de digestión anaerobia dentro de un reactor. En la Sección 5.1 se introduce el enfoque que se va a utilizar para plantear la estructura de monitorización y control para un sistema de digestión anaerobia en un reactor. Luego, en la Sección 5.2 se presenta la adaptación que se realizó del comportamiento del reactor, analizando los datos experimentales obtenidos, al modelo matemático propuesto. También se formularán las estructuras de los observadores y los estimadores que serán usados para obtener la información que no es posible medir directamente; los parámetros cinéticos, que son los indicadores de cuál es el estado de las reacciones dentro del reactor. En la Sección 5.3 se describe la estructura de los esquemas de control basados en optimización que serán usados, y la manera en que esta propuesta trabaja correctamente como un sistema de control adaptable al estado de reacción. En la sección 5.4 se muestran los resultados de las simulaciones

en las que se comprueban las bondades en el uso de los esquemas de control basados en MPC. Se usó un esquema de control tradicional PID para hacer una comparación con los resultados obtenidos por los controladores MPC y verificar que, la tecnología propuesta gestiona mucho mejor la operación de estos sistemas.

## 5.1 Introducción

Los procesos en la industria se encargan de transformar la materia prima en materiales para usos y aplicaciones dedicadas. Específicamente, los sistemas de reacciones en reactores, cumplen con estas características debido a que el material dentro de la mezcla homogénea es transformado en productos con características específicas para su uso y aprovechamiento. En estos lugares, los sistemas de monitoreo y control evitan que se llegue a puntos de inestabilidad o de baja eficiencia que hagan que el proceso no sea rentable económicamente. En este sentido, se vuelve muy interesante enfocar los esfuerzos en tratar de hacer cambios dentro de la mezcla que contiene la materia prima para obtener productos deseados con mejores características, durante la etapa de mezclado y procesamiento. Particularmente, los sistemas de digestión anaerobia, en comparación con otras tecnologías de procesamiento de materia orgánica, tienen la capacidad de digerir una gran cantidad de materia orgánica, debido a la presencia de microorganismos, para obtener biogás y lodos en el efluente mucho más limpios. Sin embargo, es muy curioso que, a pesar de que este proceso tenga una gran cantidad de ventajas, esta tecnología no se encuentre instalada masivamente a nivel industrial. El principal problema que lo impide es que estos procesos son inestables y muy sensibles bajo ciertas condiciones de operación, por lo tanto, la idea de implementar estos sistemas de monitorización y control se convierten en una herramienta fundamental de estudio para desarrollar cada vez tecnologías más estables, que trabajen de manera segura, sostenible, y opere dentro de los límites físicos establecidos [14].

Trabajar con sistemas de monitoreo y control aún representa un reto muy grande para esta industria debido a que estas estrategias tienen que ser diseñadas con serios inconvenientes estructurales como falta de conocimiento de la fenomenología, su naturaleza no lineal y la falta de sensores comerciales que impiden tener información en tiempo real del proceso. Todo lo anterior explica por qué la mayoría de los modelos matemáticos encontrados en la literatura son solo aproximaciones generalistas que no se han validado para su uso masivo [15, 5, 34]. En este contexto, existen varios retos que deben ser resueltos para hacer frente a esta problemática. Uno de ellos, fue abordado en el capítulo anterior, en donde se seleccionó un modelo matemático adecuado para propósitos de control. Sin embargo, este modelo tiene una limitación a la hora de ser implementado, y es que las propuestas en la literatura no consideran que algunos de los parámetros de este modelo presentan variaciones durante el proceso de reacción dentro del reactor. Esto genera un gran inconveniente, y es que mientras el proceso esté registrando un comportamiento, el modelo que lo representa entregue información de

que algo distinto esté ocurriendo en ese momento. Este capítulo propone solucionar dos problemas; el primero, proponer una tecnología que permita conocer el valor de los parámetros cinéticos en tiempo real para así conocer el estado de las reacciones dentro del reactor y segundo, proponer un sistema de control basado en optimización para un sistema no lineal que permita llevar al sistema a puntos de operación adecuados.

En sistemas de reacción homogénea es necesario conocer la información de las variables (estados) dentro del reactor. No obstante, en ciertas ocasiones no es posible realizar una medición directa; ya sea porque físicamente no es posible hacerlo o ya sea por el hecho de que se trate de un fenómeno químico o biológico que no es posible cuantificar directamente. En este sentido, ante la imposibilidad de medir todos los estados, tener un valor estimado permitirá implementar las estrategias de monitorización y control con el fin de reaccionar mejor para detectar fallas, trabajar adecuadamente dentro de los límites operacionales y operar con mayor eficiencia y eficacia. La ausencia de sistemas de medición especializados motiva el desarrollo de sensores virtuales para procesos químicos tanto para estimar las variables de estado como para estimar algunos de los parámetros dentro de la reacción. Para poder lograr este propósito, la primera opción que se considera es el uso de estimadores que trabajan con modelos matemáticos que tienen un nivel de detalle muy elevado [70]. Sin embargo, esta opción no es muy conveniente debido a que estos procesos son representados por ecuaciones no lineales que dificultan su uso e implementación. Adicional a ello se presentan otros inconvenientes como la dificultad en tener acceso a la información dentro del reactor debido a la falta de disponibilidad de sensores y al poco conocimiento que se tienen de los comportamientos no lineales del proceso. Para solucionar estos inconvenientes se ha usado filtros estadísticos linealizados, métodos de linealización, linealización extendida y transformaciones de estado. Este último presenta dificultades debido a que en muchas ocasiones se presenta una pérdida de la interpretación física de las variables transformadas [14]. Todas las anteriores alternativas han demostrado un bajo rendimiento y dificultades a la hora de tener que garantizar propiedades fundamentales como la estabilidad. En los últimos años se ha demostrado que los observadores asintóticos han sido propuestos sobre modelos matemáticos de relativa simplicidad. Las ventajas en el uso de esta alternativa son: su implementación es relativamente sencilla, hay mucha facilidad para verificar las condiciones que permiten su funcionamiento y la cancelación de los términos no lineales del modelo es directa. En esta tesis se usa una estructura en cascada de observadores asintóticos para la estimación de estados cuando las cinéticas de reacción son desconocidas y luego se realiza la estimación en tiempo real de las cinéticas de reacción para finalmente conocer el estado de las reacciones [71]. Esta estructura de estimación es fundamental para el funcionamiento de los sistemas de control para reactores de digestión anaerobia, por lo que en este capítulo se explicarán de qué manera se insertaron estas herramientas dentro de la estructura de monitoreo y control.

Culminada la etapa de obtención de información mediante la medición y estimación de variables, el siguiente paso consiste en diseñar la capa de monitorización y control que garantice una operación segura, sostenible y adecuada. Los registros en la literatura han demostrado que esta labor no ha sido una tarea sencilla debido a que estos sistemas tienen varios retos por resolver, como hacer frente a la falta de conocimiento de la fenomenología del sistema de reacciones, la elevada complejidad del proceso y la ausencia de sistemas de sensores adecuados. Adicionalmente, la naturaleza no lineal del proceso obliga a que deban ser usados esquemas de control no lineales [19]. Las opciones que han sido usadas van desde la implementación de controladores PI y PID no lineales, controladores linealizados, controladores robustos, controladores de lógica difusa, controladores con horizonte deslizante y controladores basados en optimización. Todas estas alternativas se enfocaron en regular el desempeño de las variables producción de gas metano, la concentración de ácidos grasos volátiles, el nivel de  $pH$  y la alcalinidad, sin embargo, estas estrategias no han hecho posible que el sistema opere en niveles satisfactorios de forma continua [40]. La mayoría de estas estrategias no han podido garantizar que la relación alcalinidad y concentración de ácidos volátiles se mantenga en niveles adecuados para que el sistema siempre esté operativo. De acuerdo con lo anterior, un esquema de control no lineal con modelos adaptativos mediante el uso de observadores y estimadores de estado se convierten en una alternativa atractiva, debido a que de esta manera se puede ir más allá dentro de la reacción y conseguir información faltante que permite interpretar mejor el fenómeno dentro del reactor.

En este trabajo, el modelo adaptable AM2 modificado con el uso de un observador de estados y estimador de cinéticas de reacción es usado para proponer un Controlador Predictivo basado en Modelo (MPC en sus siglas en inglés) para sistemas de reacción homogénea no lineales. En la programación, el uso de controladores MPC permite el ingreso de la información de las características físicas y operacionales del reactor y la mezcla de reacción homogénea, esto con el fin de establecer claramente cuáles son los límites que no deben ser superados. Dentro de la función de costo, es posible calcular las acciones de control de tal manera que estas obedezcan a un objetivo de diseño. Con el fin de reducir el costo computacional en este tipo de controladores en implementaciones, los autores [72] proponen trasladar la información de las restricciones a la función de costo, garantizando el cumplimiento de las restricciones por medio del uso de variables de ponderación. Esta propuesta necesita que el lazo de control requiera de un completo conocimiento de los estados del sistema. Por lo tanto, el observador también es desarrollado con el propósito de estimar los estados no medidos y perturbaciones.

En la sección a continuación se formula el sistema que permite la estimación de estados a partir del modelo AM2.

## 5.2 Estimación de estados y de parámetros

Además del modelado de parámetros cinéticos en biorreactores, otra de las grandes dificultades que se tienen es la ausencia de sensores de bajo costo y precisión para la medición en tiempo real de las variables de estado requeridas para implementar los esquemas de monitoreo y control [49]. Las variables que entregan información relevante del proceso, tales como las concentraciones de biomasa y sustratos, o las velocidades de reacción, por lo general, necesitan de procedimientos y análisis rigurosos de laboratorio, que en algunos casos llegan a tener un costo muy elevado [11]. Por lo tanto, el dinero requerido para mantener el personal necesario para llevar a cabo las mediciones limitan la obtención de datos necesarios periódicamente. Es por esta razón, que el diseño de alternativas que hagan posible implementaciones industriales, ocupan gran atención en la comunidad científica [70].

El diseño de sensores virtuales posibilitan la implementación en la industria y un acceso al mercado de esta tecnología. Estos algoritmos son capaces de estimar en tiempo-real las variables de estado y parámetros que no son posibles de medir directamente, haciendo uso de la información medida disponible. Existen diferentes alternativas en cuanto al tipo de sensores virtuales estudiados extensivamente en la literatura [70], que dependen del tipo de aplicación, es decir, ya sea si se requiere estimar estados o parámetros del sistema. A continuación, se plantean las bases del uso de esta tecnología tomando como referencia la ecuación general de reacción para un bioproceso, por lo tanto, se considera la dinámica general del modelo de reacción homogénea dentro del reactor como sigue.

$$\dot{\xi} = KH\rho - D\xi + F - Q. \quad (182)$$

En la anterior ecuación,  $\dot{\xi}$  es representado de la misma manera que  $\frac{d\xi}{dt}$ ,  $\rho$  representa la dinámica de la reacción en donde se encuentran los parámetros variables desconocidos. Esta información contiene la parte más importante de la estrategia de modelado adaptable debido a que el sistema de monitoreo y control debe considerar que el modelo AM2 tiene parámetros cinéticos que varían [15]. En algunas ocasiones, los términos de la matriz de coeficientes estequiométricos  $\mathbf{K}$  también son desconocidos y variables en el tiempo. Cabe hacerse notar que si se considera que ciertos parámetros de la reacción son variables en el tiempo, se evita la selección de una ecuación analítica que represente la dinámica de estos términos. Por otro lado, se pueden establecer relaciones entre la variación de los parámetros cinéticos y algunos parámetros físicos, químicos o biológicos relacionados con el desempeño de los microorganismos dentro de la mezcla homogénea en el reactor.

En ambientes de laboratorio, los sistemas anaerobios son controlados a partir de mediciones fuera de línea. Por ello, a pesar de los avances en la instrumentación, los sensores aún no son capaces de medir las variables críticas en tiempo real, dificultando la implementación de estrategias de control automáticas. Para afrontar esta limitación, se han desarrollado algoritmos

capaces de estimar (sensores virtuales) las variables que no es posible medir directamente [70]. A continuación se hace una descripción del formalismo matemático con el objetivo de plantear las estrategias de medición virtual que se necesitan para que un sistema de monitoreo y control funcione adecuadamente.

### 5.2.1 Modelo matemático para la estimación de estados

Considere la ecuación general en espacio de estados introducida anteriormente pero ahora definida de la siguiente manera.

$$\dot{\xi} = K\phi - D\xi + F - Q \quad (183)$$

La matriz  $\phi$  contiene la información correspondiente con las cinéticas de reacción del modelo matemático, si todas ellas son conocidas, la matriz no pierde su rango y se deja de esta manera. También se supone que la tasa de dilución  $D$ , los flujos de entrada  $F$  y los gases de salida producidos en la mezcla homogénea  $Q$  son conocidos. Además, suponga que una parte del total de las variables de estado son medidas y representadas por el vector  $\xi_{n1}$  tal como se muestra a continuación.

$$\xi_{n1} = L\xi, \quad (184)$$

donde la matriz  $L$  es la encargada de seleccionar los componentes del vector  $\xi$  que corresponde con los estados que son medibles. Por lo tanto, el complemento de la matriz de la ecuación (184) es  $\xi_{n2}$ , que corresponde con los elementos de la matriz  $\xi$  que no es posible medir. De acuerdo con la anterior definición, se establece una ecuación general.

$$\dot{\hat{\xi}} = K\phi - D\hat{\xi} - Q + F + \Omega(\xi_{n1} - \hat{\xi}_{n1}), \quad (185)$$

donde  $\hat{\xi}$  es el vector que contiene el valor de los estados estimados más los estados que son medidos. Este es el nuevo vector de estados. La selección de la matriz  $\Omega$  depende de los valores que contengan las matrices  $\hat{\xi}$ ,  $\xi_{n1}$  y  $\xi_{n2}$ . La anterior ecuación (185), representa una copia del sistema que se expresa en la ecuación (183). Lo novedoso de esta ecuación es que el término  $\Omega(\xi_{n1} - \hat{\xi}_{n1})$  es el encargado de llevar el estimador al mismo punto que el sistema original, ya que ante una muy buena estimación, el término  $(\xi_{n1} - \hat{\xi}_{n1})$  tiende a valer cero. La ecuación a continuación representa el error de observación.

$$e = \xi - \hat{\xi}. \quad (186)$$

Tomando la anterior ecuación, para encontrar la dinámica de error se propone resolver la siguiente ecuación, en el que la ecuación (186) se deriva a cada uno de los lados, por lo tanto se tienen que:

$$\dot{e} = \dot{\xi} - \dot{\hat{\xi}} \quad (187)$$

Si reemplazamos la información correspondiente en la anterior ecuación:

$$\dot{e} = K\phi - D\xi - Q + F - K\phi + D\hat{\xi} + Q - F - \Omega(\xi_{n1} - \hat{\xi}_{n1}). \quad (188)$$

Finalmente, al hacer las reducciones correspondientes en la ecuación anterior, la dinámica del error se escribe como:

$$\dot{e} = K(\phi(\hat{\xi} + e) - \phi(\hat{\xi})) - De - \Omega(\hat{\xi})Le \quad (189)$$

El punto de equilibrio deseado en la anterior ecuación ocurre cuando  $e = 0$ . Por lo tanto, lo correcto sería considerar una aproximación linealizada tangencial de la ecuación (189) alrededor de  $e = 0$ , por lo que se tiene:

$$\dot{e} = (A(\hat{\xi}) - \Omega(\hat{\xi})L)e, \quad (190)$$

con:

$$A(\hat{\xi}) \triangleq K \left( \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} \right)_{\xi=\hat{\xi}} - D. \quad (191)$$

De acuerdo con la ecuación (191), el diseño del observador queda finalmente representado en función de la selección de la matriz  $\Omega(\hat{\xi})$ , de tal manera que las anteriores dos ecuaciones tienen la siguiente propiedad: la ecuación (190) establece una dinámica del error que evidencia la necesidad de asignar un término que haga posible que el observador  $\hat{\xi}$  responda con una tasa rápida de convergencia exponencial y sea igual al valor de  $\xi$ . Lo anterior se logra cuando se asignan los valores propios adecuados de acuerdo con la selección de la matriz  $\Omega(\hat{\xi})$ . Si la anterior posibilidad se cumple, se dice que el sistema original es exponencialmente observable.

No obstante, cuando el sistema no es exponencialmente observable, como se mostró anteriormente, pero la dinámica del error del observador  $\dot{e}(t)$  tiene un equilibrio asintótico estable en  $e = 0$ , el proceso puede ser aún observable. Sin embargo, sus dinámicas son parcialmente determinadas por las condiciones experimentales  $A(\hat{\xi})$ . Debido a que no se puede asignar libremente la dinámica de convergencia, este tipo de observadores son llamados asintóticos.

### 5.2.2 Estimador asintótico

Desde el punto de vista del modelado matemático, existe una limitación en la industria de los procesos químicos en cuanto al trabajo que hay que realizar de caracterización de las cinéticas del proceso para poder desarrollar aplicaciones de monitoreo y control. No obstante, no es sencillo desarrollar observadores de estado, dado que se requiere tener un conocimiento completo de las dinámicas de las cinéticas de las reacciones y esta información es muy difícil de medir directamente. Este requerimiento lleva a que en estos procesos de relativa baja complejidad no haya cumplimiento de los requerimientos mínimos para su uso y no sea posible plantear observadores exponenciales. Lo anterior ha propiciado un área de investigación en la que se trabaje en la reconstrucción asintótica de los estados que no pueden ser

medidos, incluso cuando el sistema no es exponencialmente observable y las cinéticas sean desconocidas. El diseño de un observador asintótico en esta sección se plantea para las siguientes condiciones desde el punto de vista del modelo matemático: el término  $\phi$  de la ecuación (192) es desconocido, los coeficientes de la matriz  $K$  son conocidos y finalmente el número de variables de estado  $q$  es igual o mayor que el rango de la matriz  $K$ . Por lo tanto,  $q = \dim(\xi_1) \geq \text{rango}(K)$ . Para formular la estructura del observador asintótico considere el modelo general de reacciones homogéneas:

$$\dot{\xi} = K\phi(\xi, t) - D\xi - Q(\xi) + F. \quad (192)$$

Las dimensiones de las matrices de la anterior ecuación son  $\dim(\xi) = \dim(F) = \dim(Q) = N$ ,  $\dim(\phi) = M$  y  $\dim(K) = N \times M$ . Por lo tanto, se plantea una división del sistema como se muestra a continuación:

$$\dot{\xi}_a = K_a\phi(\xi_a, \xi_b) - D\xi_a - Q_a + F_a, \quad (193)$$

$$\dot{\xi}_b = K_b\phi(\xi_a, \xi_b) - D\xi_b - Q_b + F_b, \quad (194)$$

donde el rango de la matriz  $K$  es igual a  $p$ . La matriz  $K_a$  proviene de la matriz  $K$  y tiene dimensiones  $p \times M$ . La matriz  $K_b$  corresponde con la información restante no seleccionada de la matriz  $K$ . Finalmente, las matrices  $(\xi_a, \xi_b)$ ,  $(Q_a, Q_b)$  y  $(F_a, F_b)$  se generan automáticamente debido a las particiones propuestas por las matrices  $K_a$  y  $K_b$ . Por lo tanto, una vez se haya llevado a cabo el anterior procedimiento, se puede plantear la siguiente propiedad: existe una transformación de datos en la que se considera a la matriz  $Z_{ob}$  como a una combinación lineal de los vectores  $\xi_a$  y  $\xi_b$ , por lo tanto se tiene que:

$$Z_{ob} = A_0\xi_a + \xi_b. \quad (195)$$

Si se deriva la anterior ecuación a ambos lados se tiene que:

$$\dot{Z}_{ob} = A_0\dot{\xi}_a + \dot{\xi}_b. \quad (196)$$

Si se reemplaza la ecuación (193) en la ecuación (196) se tiene que:

$$\dot{Z}_{ob} = A_0(K_a\phi - DX_a - Q_a + F_a) + K_b\phi - DX_b - Q_b + F_b. \quad (197)$$

Por lo tanto, si se resuelven los términos de los paréntesis, tenemos que:

$$\dot{Z}_{ob} = A_0K_a\phi - A_0DX_a - A_0Q_a + A_0F_a + K_b\phi - DX_b - Q_b + F_b, \quad (198)$$

A continuación se agrupan los términos de la anterior ecuación de la siguiente manera:

$$\dot{Z}_{ob} = -D(A_0X_a + X_b) + A_0(F_a - Q_a) + F_b - Q_b + A_0K_a\phi + K_b\phi. \quad (199)$$

Por lo tanto, si se reemplaza la ecuación (196) en la ecuación (199) se tiene que:

$$\dot{Z}_{ob} = -DZ_{ob} + A_0(F_a - Q_a) + F_b - Q_b + \underbrace{\phi(A_0K_a + K_b)}_{eliminar}. \quad (200)$$

Uno de los objetivos, por lo tanto, se convierte en eliminar el término  $\phi(A_0K_a + K_b)$  de la anterior ecuación. Para poder lograr este propósito se debe cumplir entonces que:

$$A_0K_a + K_b = 0, \quad (201)$$

ya que de lo contrario el término  $\phi = 0$ . Por lo tanto, se plantea que el término  $\phi \neq 0$ . En el sistema de ecuaciones a continuación se incluye el nuevo estado  $Z_{ob}$ , por lo tanto, se tiene que el nuevo sistema de ecuaciones dinámico está representado por:

$$\dot{\xi}_a = K_a\phi(\xi_a, \xi_b) - D\xi_a - Q_a + F_a, \quad (202)$$

$$\dot{Z}_{ob} = -DZ_{ob} + A_0(F_a - Q_a) + (F_b - Q_b). \quad (203)$$

Finalmente, cuando el término  $F_a - Q_a = 0$ , la partición del sistema que se lleva a cabo en las ecuaciones (193) y (194) es adecuada debido a que las dinámicas que se encuentran en el vector  $Z_{ob}$  son independientes de las matrices  $K$  y  $\phi$ . La ecuación (202) nos dice es que esta dinámica es independiente del vector  $\phi$ , es decir, de la información de las cinéticas de reacción.

### Diseño del observador

Como se observó anteriormente, el modelo AM2 modificado considera que la información contenida en los estados  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $S_1$  y  $S_2$  se pueden separar en un subsistema, independiente de los estados carbono inorgánico  $C$  y alcalinidad  $Z$ . Por lo tanto, ajustando el subsistema seleccionado a la estructura del observador en este capítulo tenemos las siguientes matrices correspondientes.

$$\xi = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ DS_{1in} \\ DS_{2in} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -k_1 & 0 \\ k_2 & -K_3 \end{bmatrix}, \quad \phi = \begin{bmatrix} \mu_1 X_1 \\ \mu_2 X_2 \end{bmatrix}. \quad (204)$$

De acuerdo con la anterior ecuación (204), el modelo general de biorreactores que será considerado para plantear el modelado del observador asintótico es:

$$\begin{bmatrix} \dot{X}_1 \\ \dot{X}_2 \\ \dot{S}_1 \\ \dot{S}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -k_1 & 0 \\ k_2 & -K_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} - D \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ S_1 \\ S_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ DS_{1in} \\ DS_{2in} \end{bmatrix}. \quad (205)$$

De acuerdo con la anterior ecuación, se puede concluir lo siguiente.

- Se podrían incluir a las variables de estado el carbono inorgánico  $C$  y la alcalinidad  $Z$ , debido a que el sistema propuesto para estimar se encuentra desacoplado, por lo que no afectaría la estructura de estimación.
- La información contenida en los vectores  $Q_a$  y  $Q_b$  no está presente, esta información está contenida dentro de la dinámica del carbono inorgánico  $C$ .
- En nuestro caso, los valores de  $Q_1$  y  $Q_2$  corresponden con las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$ .

De acuerdo con los anteriores condicionantes, se separa el sistema en los vectores  $\xi_a$  y  $\xi_b$ , de tal manera que cada uno de ellos contenga la información de los estados medidos ( $S_1$  y  $S_2$ ) y los no medidos ( $X_1$  y  $X_2$ ) respectivamente. Por lo tanto, se tiene que:

$$\xi_a = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}, \quad \xi_b = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \quad (206)$$

Si reemplazamos la información de los anteriores vectores en la ecuación (195) se tiene que:

$$Z_{ob} = \begin{bmatrix} Z_{ob1} \\ Z_{ob2} \end{bmatrix} = [A_0\xi_a + \xi_b] = \begin{bmatrix} \frac{1}{K_1} & 0 \\ \frac{K_2}{K_1K_3} & \frac{1}{K_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \quad (207)$$

Se puede reescribir el vector  $Z$  como una combinación lineal de los vectores  $\xi_1$  y  $\xi_2$  que corresponden con los estados medidos y no medidos:

$$Z_{ob} = A_1\xi_1 + A_2\xi_2 \quad (208)$$

Si comparamos la anterior ecuación (207) con la ecuación (208), por comparación obtenemos las siguientes relaciones:

$$A_2 = I \quad (209)$$

$$K_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (210)$$

$$K_a = \begin{bmatrix} -K_1 & 0 \\ K_2 & -K_3 \end{bmatrix}, \quad (211)$$

de acuerdo con la información suministrada por las anteriores matrices, el valor de  $A_0$  se obtiene si esta variable se despeja de la ecuación (201). Por lo tanto:

$$A_0 = -K_b K_a^{-1} \quad (212)$$

De acuerdo con la anterior ecuación se tiene que:

$$A_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{k_1} & 0 \\ \frac{k_2}{k_1 k_3} & \frac{1}{k_3} \end{bmatrix} \quad (213)$$

Una vez se han obtenido las anteriores ecuaciones, a continuación el problema se divide en los estados que quieren ser estimados con del observador asintótico, que son  $Z_{ob_1}$  y  $Z_{ob_2}$ , y los estados medidos que son  $S_1$  y  $S_2$ , por lo que al despejar el vector  $\xi_b$  de la ecuación (195) se tiene lo siguiente.

$$\xi_b = Z_{ob} - A_0 \xi_a \quad (214)$$

Así entonces, los valores de  $\xi_a$ ,  $\xi_b$ ,  $A_0$ , y  $Z_{ob}$  están dados por.

$$\xi_b = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix}, \quad A_0 = \begin{bmatrix} \frac{1}{k_1} & 0 \\ \frac{k_2}{k_1 k_3} & \frac{1}{k_3} \end{bmatrix}, \quad \xi_b = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \quad (215)$$

Los estados  $X_1$  y  $X_2$  son desconocidos, y ahora, las variables  $Z_{ob_1}$  y  $Z_{ob_2}$  son las nuevas dinámicas que son independientes de la cinética de reacción que está contenida en la matriz  $\phi$ . La matriz  $A_0$  contiene la información de los parámetros estequiométricos, las variables  $S_1$  y  $S_2$  son los estados que van a ser estimados. Los valores de las matrices correspondientes  $F_a$  y  $F_b$  se calculan teniendo en cuenta los estados medidos y no medidos que se seleccionaron en la ecuación (206):

$$F_a = \begin{bmatrix} DS_{1in} \\ DS_{2in} \end{bmatrix}, \quad F_b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (216)$$

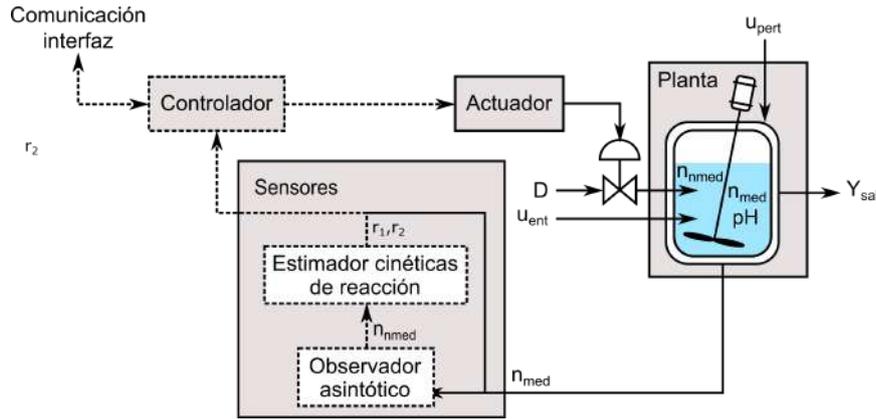
Finalmente, una vez obtenida la información de las anteriores ecuaciones, usando la ecuación (200) se puede formular la dinámica de  $Z_{ob}$  como sigue:

$$\dot{Z}_{ob} = -DZ_{ob} + A_0(F_a - Q_a) + (F_b - Q_b) \quad (217)$$

### 5.2.3 Estimador de cinéticas de reacción (estimación de perturbaciones)

En esta sección se plantea el uso de un estimador adicional que se encarga de estimar las cinéticas de reacción consideradas dentro del reactor en tiempo real. Como se presentó en la anterior sección, las variables de estado desconocidas del sistema fueron estimadas aún desconociendo las cinéticas de reacción contenidas en la matriz  $\phi$ . La Figura 47 muestra la estructura jerárquica del observador asintótico y el estimador de las cinéticas de reacción que hacen posible obtener toda la información del sistema, y por lo tanto, hacer posible el planteamiento de un sistema de control basado en modelo matemático que se adapta al estado de la reacción dentro del reactor.

En la anterior figura, se muestra el flujo de información de todo el sistema en el que finalmente, en línea discontinua, se establece un sistema de control. Como se observa, el bloque de los Sensores contiene la estructura observador asintótico-estimador cinética de reacción. Se observa la manera en que se lleva a cabo el intercambio de información entre este bloque y el sistema, de



**Figura 47:** Estructura, observador asintótico y estimador cinética de reacciones.

igual manera con el bloque controlador. Con el fin de formular el estimador de cinéticas de reacción, considere nuevamente la ecuación de procesos de reacción homogénea dentro de reactores descritos anteriormente:

$$\dot{\xi} = K\phi - D\phi - Q + F \quad (218)$$

En la ecuación (218) se asume que los coeficientes de la matriz  $K$  son conocidos y que el coeficiente de dilución  $D$ , los flujos de entrada al reactor  $F$  y los flujos de salida gaseosos  $Q$  son medidos en tiempo real. Además, se asume que el vector de estados  $\xi$  es estimado usando el observador asintótico mostrado en la anterior sección. Considere que el vector  $\phi$  es parcialmente conocido y, por lo tanto, se divide en dos términos de la siguiente manera:

$$\phi = H\rho, \quad (219)$$

donde la matriz  $H$  contiene la información de las cinéticas de reacción que son conocidas y el vector  $\rho$  contiene la información de las cinéticas de reacción que son desconocidas. Por lo tanto, reemplazando la ecuación (219) en la ecuación (218) se tiene que:

$$\dot{\xi} = KH\rho - D\phi - Q + F. \quad (220)$$

De esta forma, la estimación de las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$ , se reduce a la estimación del vector  $\rho$  que contiene esta información. A continuación, se plantea la estructura del nuevo sistema dinámico.:

$$\dot{\hat{\xi}} = KH\hat{\rho} - D\xi - Q + F - \Omega(\xi - \hat{\xi}), \quad (221)$$

$$\dot{\hat{\rho}} = (KH)^T\Gamma(\xi - \hat{\xi}), \quad (222)$$

donde  $\hat{\rho}$  representa la estimación en tiempo real del vector cinéticas de reacción  $\rho$  y  $\Gamma$  representa la matriz de pesos que controla la convergencia de la dinámica de  $\hat{\rho}$ . Note que en la ecuación 222, cuando  $\xi - \hat{\xi} = 0$ , significa que cuando eso ocurre se ha llegado al valor de referencia. No se tiene

referencia para el valor de  $\rho$  en la estimación de las cinéticas de reacción, por lo tanto, la referencia que se usa es la única que está habilitada y es  $\xi$ . A diferencia de la ecuación 221, en la que cuando se llega a  $\xi - \hat{\xi} = 0$  el estimador converge directamente al valor de referencia  $\hat{\xi} = \xi$ , cuando el término  $\xi - \hat{\xi} = 0$  en la ecuación 222, lo que significa es que el valor de  $\dot{\rho} = 0$ , lo que quiere decir que se ha llegado al valor correcto de las cinéticas de reacción  $\hat{\rho} = \rho$  debido a que no hay cambio en su valor. El término  $\xi - \hat{\xi}$  se usa como referencia en toda la estructura de estimación. La única condición que hay que cumplir es que  $\Sigma^T \Gamma + \Gamma \Sigma$  sea definida negativa. Esto se debe a que el otro término que acompaña a la ecuación (222) es  $(KH)^T \Gamma$ .

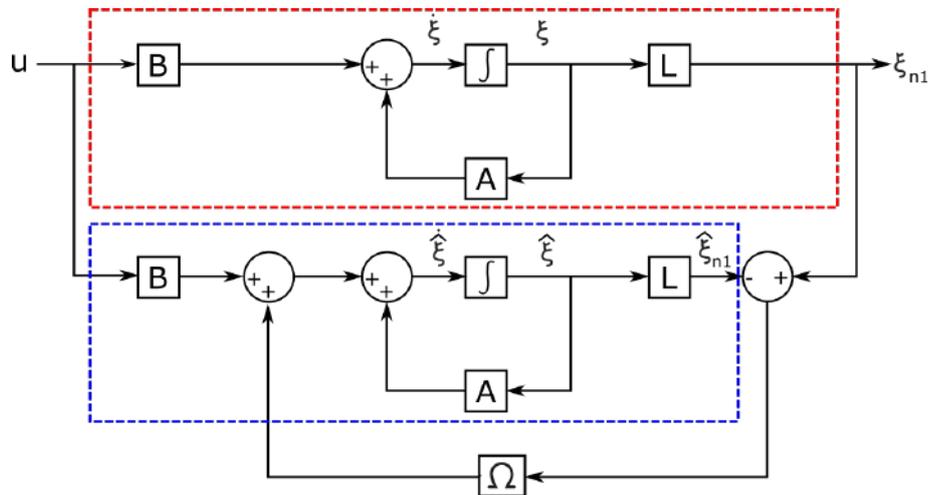
Note que la ecuación (221), la cual representa al estimador de cinéticas de reacción, tiene una similitud muy grande respecto a la ecuación del observador de Luenberger [70] general para sistemas de reacción homogénea [34]. A partir de la Figura (48), se puede inferir que si tomamos la ecuación de la dinámica de las variables de estado del sistema linealizado (área de color rojo en la Figura 48), se consigue el siguiente resultado.

$$\dot{\hat{\xi}} = \underbrace{A\hat{\xi} + Bu}_{1^*} + \Omega(\xi - \hat{\xi}). \quad (223)$$

Como se observa, la región que está resaltada con  $1^*$  es exactamente la misma que la región resaltada con  $1^*$  en la ecuación (221) como se muestra a continuación en la siguiente ecuación.

$$\dot{\hat{\xi}} = \underbrace{KH\hat{\rho} - D\xi - Q + F}_{1^*} - \Omega(\xi - \hat{\xi}). \quad (224)$$

La anterior ecuación (224) es la representación del sistema no lineal y la ecuación (223) trabaja sobre el sistema equivalente linealizado. En la Figura 48 la región en color azul representa el observador de estados genérico de Luenberger, en el que el factor de corrección es  $\Omega(\xi - \hat{\xi})$ .



**Figura 48:** Diagrama de bloques observador de estados Luenberger genérico.



sobre las propiedades de estabilidad. Una selección habitual de estos valores es.

$$\Omega = \text{diag}\{-w_i\}, \quad \text{para } i = 1, \dots, N \quad (225)$$

con.

$$\Gamma = \text{diag}\{\gamma_j\}, \quad \text{para } j = 1, \dots, r \quad (226)$$

### Diseño del observador

Para diseñar el estimador de las cinéticas de reacción, la única referencia que se puede seguir es  $\hat{\xi}$ . Tanto en el observador asintótico como en la ecuación (221), aparece el término  $\xi - \hat{\xi}$ . Esto tiene mucho sentido debido a que una vez el término  $\Omega(\xi - \hat{\xi})$  se hace cero, entonces  $e = \xi - \hat{\xi} = 0$ , lo que quiere decir que la estimación es igual a la medición. Esta dinámica es gobernada por  $\dot{e} = (A - \Omega L)e$ . Así entonces, para garantizar la convergencia de la ecuación (222), note que en la ecuación (221) tenía mucho sentido que el término  $\Omega(\xi - \hat{\xi})$  tendiera a cero, sin embargo, no tiene el mismo sentido para el término  $\Gamma(\xi - \hat{\xi})$ . Además, en la ecuación (221) la referencia para llevar a cabo la estimación es  $\xi$ , ahora, de acuerdo con la ecuación (222) las nuevas referencias para encontrar la estimación de las cinéticas de reacción son  $\xi$ ,  $\hat{\xi}$ ,  $K$  y  $H$ , que es la parte de las cinéticas de reacción que se conoce.

A continuación se plantean las siguientes definiciones.

- $e = \xi - \hat{\xi} \rightarrow$  Error de observación
- $\tilde{\rho} = \rho - \hat{\rho} \rightarrow$  Error de seguimiento

Por lo tanto, tomando las siguientes dos ecuaciones:

$$\dot{\hat{\xi}} = KH\hat{\rho} - D\xi - Q + F - \Omega(\xi - \hat{\xi}) \quad (227)$$

$$\dot{\hat{\xi}} = K\phi - D\xi - Q + F \quad (228)$$

Derivando a ambos lados el error de observación y el error de seguimiento, se tiene que  $\dot{e} = \dot{\xi} - \dot{\hat{\xi}}$  y  $\dot{\tilde{\rho}} = \dot{\rho} - \dot{\hat{\rho}}$ . Reemplazando las ecuaciones (229) y (230) en  $\dot{e}$ , se tiene que:

$$\dot{e} = K\phi - D\xi - Q + F - KH\hat{\rho} + D\xi + Q - F + \Omega(\xi - \hat{\xi}) \quad (229)$$

$$\dot{e} = K\phi - KH\hat{\rho} + \Omega e \quad (230)$$

$$\dot{e} = KH\rho - KH\hat{\rho} + \Omega e \quad (231)$$

$$\dot{e} = KH(\rho - \hat{\rho}) + \Omega e \quad (232)$$

$$\dot{e} = KH\tilde{\rho} + \Omega e \quad (233)$$

Para el error de seguimiento considere:

$$\dot{\tilde{\rho}} = -(KH)^T \Gamma e + \frac{d\rho}{dt}. \quad (234)$$

Juntando las ecuaciones (233) y (234), se obtiene un nuevo sistema dinámico de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} \dot{e} \\ \dot{\tilde{\rho}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} KH\tilde{\rho} + \Omega e \\ -(KH)^T \Gamma e + \frac{d\rho}{dt} \end{bmatrix} \quad (235)$$

por lo que al separar la anterior matriz se tiene la siguiente ecuación:

$$\begin{bmatrix} \dot{e} \\ \dot{\tilde{\rho}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Omega & KH \\ -H^T K^T \Gamma & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e \\ \tilde{\rho} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{d\rho}{dt} \end{bmatrix}, \quad (236)$$

haciendo el siguiente reemplazo de matrices:

$$A = \begin{bmatrix} \Omega & KH \\ -H^T K^T \Gamma & 0 \end{bmatrix} \quad (237)$$

$$V = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{d\rho}{dt} \end{bmatrix} \quad (238)$$

entonces tenemos el siguiente resultado:

$$\begin{bmatrix} \dot{e} \\ \dot{\tilde{\rho}} \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} e \\ \tilde{\rho} \end{bmatrix} + V \quad (239)$$

A continuación se reemplazan los valores de las matrices de acuerdo a cómo se ha planteado el uso del estimador de cinéticas de reacción. De acuerdo con la definición presentada en la anterior sección, se hace la división de las matrices tomando en cuenta la ecuación general de reacciones homogéneas para un reactor. Por lo tanto se tiene el siguiente resultado:

$$K_a = \begin{bmatrix} -k_1 & 0 \\ k_2 & -k_3 \end{bmatrix}, \quad K_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad F_a = \begin{bmatrix} DS_{1in} \\ DS_{2in} \end{bmatrix}, \quad F_b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (240)$$

El siguiente paso consiste en calcular la matriz  $A_0$  proveniente de la ecuación (198), entonces:

$$A_0 = -K_b K_a^{-1}. \quad (241)$$

A continuación, se divide el problema en los estados que quieren ser estimados con la información que contiene el observador asintótico, que son  $Z_1$  y  $Z_2$ , y los estados que puedo medir dentro del sistema anaerobio, que son  $S_1$  y  $S_2$ . De esta forma, despejando el vector  $\xi_b$  de la ecuación (195) se tiene que:

$$\xi_b = Z - A_0 \xi_a. \quad (242)$$

El anterior planteamiento permite encontrar el valor de las siguientes matrices:

$$K = \begin{bmatrix} K_b \\ K_a \end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \xi = \begin{bmatrix} \xi_b \\ S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} F_b \\ F_a \end{bmatrix} \quad (243)$$

Por último, se tiene toda la información necesaria para usar las ecuaciones (221) y (222), que son respectivamente las dinámicas estimadas de las variables de estado y de las cinéticas de reacción respectivamente, por lo tanto:

$$\frac{d\hat{\xi}}{dt} = KH\hat{\rho} - D\xi - Q + F - \Omega(\xi - \hat{\xi}) \quad (244)$$

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = (KH)^T \Gamma(\xi - \hat{\xi}) \quad (245)$$

Finalmente, las anteriores dos ecuaciones permiten obtener el valor de las cuatro variables de estado observadas y el valor de las dos cinéticas de reacción estimadas.

### 5.3 Control de los digestores anaerobios industriales

La automatización y el escalado a nivel industrial de los digestores anaerobios, tiene retos en la operación de estos sistemas que aún deben ser superados. Esto ocurre porque el proceso puede llegar a ser inestable debido a su alta sensibilidad ante los cambios en el caudal de entrada (influyente), y también, debido a la composición química y biológica del lote de materia orgánica. Se trata entonces de un proceso complejo desde el punto de vista microbiano [73]. Por tanto, una oportunidad de mejora supone plantear un método de control efectivo que permita optimizar el proceso.

A pesar de los avances que se han logrado en el desarrollo de sensores más económicos y fiables, de modelos más precisos y de la implementación de sistemas de monitoreo y control, no ha sido posible generar una solución integral y automática que soporte la decisión de un operador mediante recomendaciones [15]. En los últimos años el control sobre estos sistemas solo ha permitido vigilar las variables que entreguen indicadores de cómo se encuentra el estado del proceso. En este sentido, las actuaciones que se hacen sobre el sistema van desde modificar la tasa de dilución  $D$  hasta agregar bases que permitan corregir el nivel de pH y restaurarlo a valores operativos normales. También se monitoriza constantemente el nivel de producción de biogás para que este se encuentre en niveles de generación adecuados, se vigila que el porcentaje de limpieza de la demanda química de oxígeno sea correcta en el efluente y que la mezcla no supere su nivel de acidez lo suficiente de tal manera que el rendimiento del sistema disminuya. Todo lo anterior indica que las actuaciones que se hacen sobre estos sistemas, bajo la supervisión de operarios, quizás no sean oportunas o se hagan correcciones de manera inadecuada, lo que hace que empeore el funcionamiento del reactor o se mantenga en niveles de operación incorrectos [44]. Además de lo comentado anteriormente, existen perturbaciones que afectan el funcionamiento del sistema, por lo cual, llevar a cabo una operación bajo estas

condiciones implica grandes riesgos para garantizar su estabilidad.

Existe entonces un desafío muy interesante alrededor de la instalación de sistemas de control basados en predicción, debido a que estas herramientas hacen posible tomar decisiones sobre el estado actual del sistema basado en el comportamiento de posibles escenarios a futuro. Aunque a escala de laboratorio se ha demostrado que existen implementaciones de control que operan con niveles adecuados de rendimiento, los ambientes reales plantean situaciones inesperadas y difíciles de gestionar que fácilmente llevan al sistema fuera de sus regiones de operación adecuadas, por lo que el planteamiento de un estudio valide con nuevas tecnologías la eficacia en los resultados, usando datos reales a escala industrial, supone un importante aporte en este campo de la ingeniería.

El problema más común que se presenta cuando se opera un reactor de digestión anaerobia es que, durante la operación del sistema, se presenta acumulación de ácidos grasos volátiles (AGV) debido al aumento en la actividad metabólica en la etapa acidogénica, lo que hace que la etapa metanogénica (uso de los AGV como sustrato para obtener biogás) se vea restringida y la eficiencia del reactor se vea reducida. Esto hace que el proceso se vuelva inestable, y como resultado, se produzca una disminución en el valor del nivel de pH. En la mayoría de las ocasiones esta perturbación lleva al sistema a un estado de inhibición en el que se ven afectados los microorganismos metanogénicos (este grupo de arqueas entran en una etapa de baja actividad metabólica, en otras palabras, se adormecen). Para solucionar este problema, la alternativa no solo es llevar el nivel de pH a valores deseados adicionando bases a la mezcla, sino que se debe tratar de mantener el efecto tampón del sistema o capacidad de tolerancia de ácidos [34]. Es decir, resulta recomendable usar la alcalinidad como indicador de la estabilidad del proceso. Un valor de alcalinidad adecuado ( $> 2500 \text{ mg de CaCO}_3 \text{ L}^{-1}$ ) asegura que el sistema tenga la capacidad de hacer frente a los incrementos en los valores del AGV. Normalmente, con fines de control, se emplea una relación entre el valor del AGV y alcalinidad para conocer la capacidad tampón (la capacidad de resistencia con la que se cuente) ante la acumulación de ácidos. Esta ratio debe ser siempre inferior a 0.5. Para algunos sustratos orgánicos encontrándose el valor óptimo se encuentra entre 0.1 y 0.35, lo que permite mantener el reactor un rango de nivel de pH cercano a la neutralidad (6.5-7.5), adecuado para el desarrollo del proceso, especialmente para que todo funcione correctamente en la etapa de metanogénesis [48].

### **Controlador predictivo basado en modelo (MPC)**

El desarrollo de estrategias de control basadas en optimización requiere de modelos matemáticos que sean capaces de representar el comportamiento de las dinámicas de los sistemas en los procesos, con una precisión lo suficientemente elevada que a su vez sea viable computacionalmente. Para llevar a cabo este propósito, en la actualidad muchas de las estrategias de control

que existen basan la representación de las dinámicas mediante el uso de modelos macroscópicos [14], [65]. A pesar de que en la mayoría de los casos se logra una muy buena aproximación a la realidad, en algunas ocasiones la carga computacional es severa, debido a que puede que el número de variables a optimizar crezca exponencialmente debido a la implementación de sistemas a gran escala. Lo anterior hace inviable el uso de estas soluciones por la gran cantidad de recursos computacionales que se requieren al momento de realizar implementaciones. Una alternativa que surge, por lo tanto, es hacer una simplificación de los modelos de tal manera que sea posible simular la evolución de las dinámicas bajo todos los escenarios sin comprometer la representación de la realidad.

Partiendo de la anterior condición, han sido implementados esquemas de control óptimo con las bondades de los controladores predictivos basados en modelo (MPC) debido a que se puede hacer un uso explícito tanto de las restricciones físicas como operacionales [74]. El rendimiento de este tipo de esquemas de control frente a otros usados comúnmente en el sector muestran un desempeño superior, lo que los hace muy atractivos a la hora de ser escogidos como alternativa [32], [62]. Los esquemas MPC tienen la ventaja de anticiparse a perturbaciones y escenarios críticos de operación, lo anterior significa que las decisiones basadas en la prevención de escenarios futuros para calcular las acciones de control, permiten mejorar el rendimiento de estos sistemas sustancialmente.

La implementación de sistemas de control MPC son muy similares en su estructura, sin embargo, las diferencias en la formulación de la función de costo y en las restricciones pueden cambiar su desempeño. La estructura general del esquema de control y su funcionamiento se muestra a continuación.

### **Modo de operación y estructura de un MPC**

El esquema de control MPC, es una metodología que calcula en cada tiempo de muestreo (que para nuestro caso se ha programado para que tenga un tamaño de paso variable y se resuelva usando la función @ode45) las acciones de control óptimas del sistema luego de resolver un problema de optimización [13]. Los elementos fundamentales que hacen parte de la estructura del controlador MPC son mostrados en la Figura 50, estos son: 1) Uso de un modelo de predicción sobre un horizonte de predicción, 2) cálculo de una secuencia de acciones de control futuras a través de la solución de un problema de optimización, sujeto a una función objetivo, restricciones tanto físicas como operacionales en el proceso y un comportamiento deseado para el sistema, 3) Uso de una estrategia de horizonte deslizante, es decir, el proceso de optimización es repetido en cada tiempo de muestreo, donde la acción de control en el instante actual es aplicada al sistema, y finalmente 4) Bloque observador encargado de estimar tanto las variables de estado que no es posible medir directamente como las cinéticas de reacción que se necesitan conocer para saber el estado de la reacción en la mezcla homogénea

dentro del reactor. [74]. Como se observa en la figura 50, el esquema MPC requiere que se conozcan todos los estados del sistema, tanto los medidos como los estimados. Las mediciones provienen directamente del sistema, en tanto las estimaciones ( $\hat{x}$ ) son provistas por el observador de estados a partir de las entradas  $u_i$ , las señales de control  $u_c$  y de las mediciones  $y$  a la salida del sistema. Además de los estados, el controlador necesita de un objetivo (función de costo), un modelo matemático que represente al sistema y que explícitamente se describan las restricciones físicas y operacionales. Todo lo anterior hace posible que se calculen las predicciones de la trayectoria de las variables a controlar del sistema sobre un horizonte temporal  $N_P$  a través de las variables manipuladas  $u_c$ .  $N_C$  es el horizonte de control, de tal manera que  $M \simeq P$ . Todo esto se lleva a cabo dentro del bloque optimización.

Durante cada paso  $k$ , el optimizador calcula los valores de los estados futuros a través de las variables manipuladas durante todo el horizonte de predicción  $M$ ,  $u(k|k), \dots, u(k+M-1|k)$ , de tal manera que el valor de los estados en el horizonte de predicción siga la trayectoria operativa adecuada.

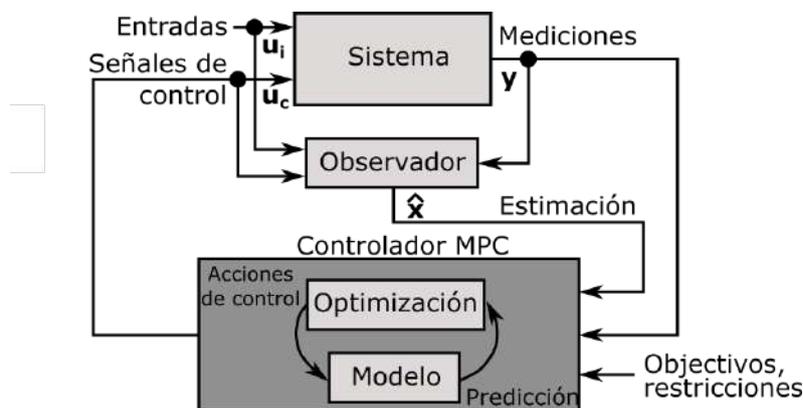
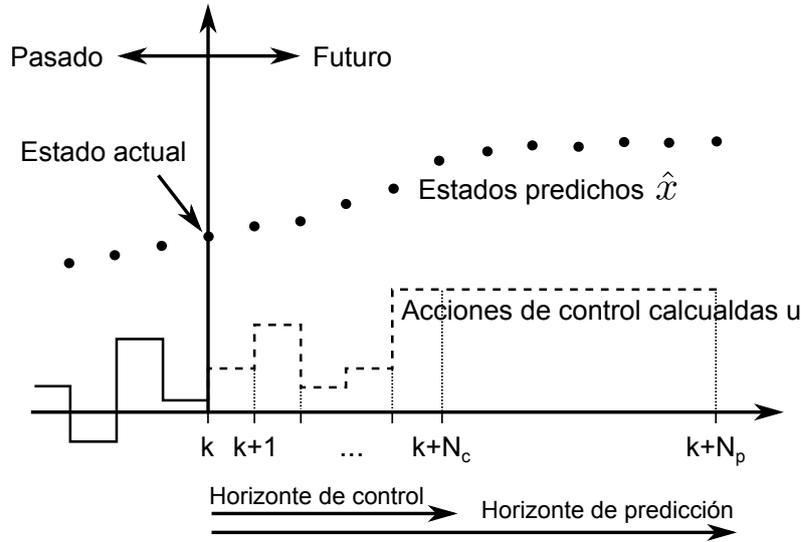


Figura 50: Esquema de control MPC.

El optimizador toma en cuenta como referencia las restricciones a las entradas y salidas. Para sistemas no lineales, la programación se plantea como la solución a un problema de optimización no lineal, que en la mayoría de los casos es no convexo. Solamente  $u(k|k)$ , el primer movimiento de la secuencia es implementado en el sistema anaerobio real. En el tiempo  $k+1$ , la medición de  $y(k+1)$  es usada en conjunto con los valores de las entradas y las señales de control  $u_i(k+1)$  y  $u_c(k+1)$  respectivamente. También se toma la información del observador de estados y el estimador de cinéticas de reacción  $\hat{x}(k+1)$ .

Los horizontes de control y predicción  $N_p$  y  $N_c$  se mueven un paso hacia adelante, a  $k+1$ . A partir de ese momento entonces se resuelve un nuevo problema de optimización con una nueva condición inicial. De esta manera, debido a que la ventana de predicción es móvil, este proceso es llamado estrategia de horizonte deslizante. En la Figura 51 se explica en detalle la manera en que evoluciona el sistema de predicción. Para cada tiempo de muestreo  $k$  en el controlador MPC, se miden las variables en el sistema que



**Figura 51:** Horizonte de control y predicción en MPC.

van a ser ingresadas al modelo de predicción dentro del algoritmo de optimización. Con la información de las restricciones físicas y operacionales, sujeto a una función objetivo, se calculan las acciones de control óptimas basado en la evolución de los estados en todo el horizonte de predicción. De todo el conjunto de acciones de control  $u$  calculadas en todo el horizonte de predicción (Ver Figura 51), son aplicadas al sistema únicamente las correspondientes al tiempo de muestreo  $k$  (tiempo presente). En el siguiente tiempo de muestreo del controlador  $k + 1$ , un nuevo problema de optimización es resuelto bajo las nuevas condiciones de operación (horizonte deslizante). Debido a la necesidad de reducir el tiempo computacional gastado por este tipo de esquemas de control a la hora de ser implementados en sistemas a gran escala, se define un horizonte de control (ver Figura 51), de tal manera que  $N_c \leq N_p$ . Si la anterior condición se cumple, el algoritmo de optimización únicamente tendrá la posibilidad de variar las acciones de control óptimas calculadas hasta el tiempo de muestreo  $k + N_c$ . Desde el tiempo de muestreo  $k + N_c + 1$  hasta el final del horizonte de predicción (tiempo de muestreo  $k + N_p$ ), las acciones de control se mantienen constantes. Para la formulación general de un MPC considere el siguiente sistema no lineal:

$$x(k + 1) = F(x(k), u(k), k); \text{ con } x(0) \text{ y } u(0) \text{ conocidos,} \quad (246)$$

$$y(k) = G(x(k), u(k), k). \quad (247)$$

La ecuación a continuación muestra el tren de acciones de control calculadas para cada tiempo de muestreo en el que el optimizador funciona dentro del bloque del controlador MPC si  $N_c \leq N_p$  se cumple. La secuencia óptima de control es  $\{u(k), \dots, u(k + N_c)\}$  que minimiza el siguiente problema de optimización:

$$\max_{u(k), \dots, u(k+N_c)} J(u(k), y(k), w(k)) \quad (248)$$

sujeto a:

$$\begin{aligned} x(k+1) &= f(x(k), u(k)), \\ y(k) &= g(x(k), u(k)), \\ x_{min} &\leq x(k), \forall k = 1, \dots, N_p \\ u_{min} &\leq u(k) \leq u_{max}, \forall k = 1, \dots, N_u \\ \frac{S_2(k)}{Z(k)} &\leq \lambda, \forall k = 1, \dots, N_p \end{aligned} \quad (249)$$

donde  $J(\cdot)$ ,  $x(k)$ ,  $y(k)$ ,  $w(k)$ ,  $g(\cdot)$  y  $f(\cdot)$  son la función de costo que alberga cada uno de los objetivos en el diseño del esquema de control MPC, los estados del sistema, la salida del sistema, la señal de referencia, y las dinámicas del modelo del sistema respectivamente [13]. La funcional de costo propuesta es la siguiente.

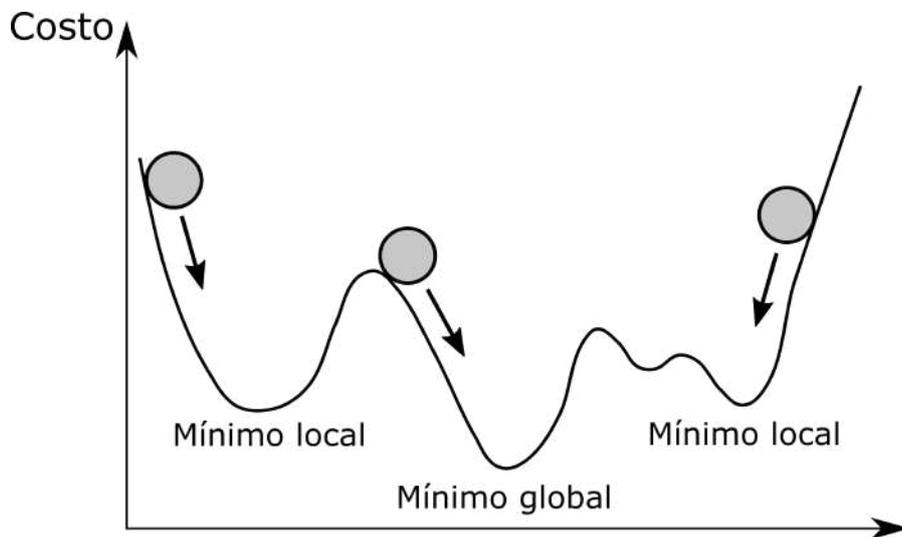
$$J(u(k), y(k), w(k)) = \sum_{i=1}^{209} X_2(i) \mu_2(i) k_6 \quad (250)$$

La anterior ecuación corresponde con la sumatoria del valor del volumen de metano producido durante todo el tiempo de experimentación. Por lo tanto, lo que propone esta ecuación dentro del problema de optimización es hacer que la acción de control calculada, que es la tasa de dilución  $D$ , maximice la sumatoria de producción de volumen de metano durante todo el tiempo de experimentación. El vector  $x_{min}$  son los límites inferiores de las variables de estado que para nuestro caso son 0, lo que implica que en todo el tiempo de experimentación los valores de los estados no pueden ser menores que este valor. Los valores  $u_{min}$  y  $u_{max}$  son los límites inferior y superior de la acción de control tasa de dilución  $D$ , que para este caso son 0 y 1 respectivamente. Para el caso de la última restricción, que plantea una relación entre las variables de estado  $S_2$  y  $Z$ ,  $\lambda$  representa la capacidad de buffer, que es la capacidad que tiene la mezcla homogénea para absorber ácido. En otras palabras, es la cantidad de alcalinidad presente en el sistema. Una vez la capacidad de buffering se excede, el valor del  $pH$  cambia rápidamente. Esto ocurre porque la cantidad de ácido se ha agotado a través de la neutralización.

### Evaluación de la arquitectura de controladores MPC

En esta sección se plantean las propuestas para el diseño de los sistemas de control MPC que serán usadas para cumplir con el objetivo de aumentar la producción de metano, y a su vez, mantener el reactor dentro de los límites operacionales que eviten detener o reducir el rendimiento dentro del reactor.

El primer diseño que se propone es un controlador MPC sin restricciones. La propuesta consiste en dejar en libertad el cálculo de las acciones de control óptimas (tasa de dilución  $D$ ) para que el optimizador lleve la producción de metano al máximo, sin importar las condiciones de operación a las que se encuentren los microorganismos dentro de la mezcla homogénea. Por lo tanto, en el problema de optimización que se enuncia en la ecuación (248) se elimina la última restricción de buffering capacity (relación de soporte de nivel de acidez dentro del reactor  $S_2/Z$ ). Este controlador se ejecuta bajo dos modalidades, con y sin la función multistart (que dentro del algoritmo, al momento de evaluar las condiciones iniciales, se exploran múltiples opciones y se decide por cuál de los diferentes horizontes existe el mejor rendimiento en la función de costo). Cuando se usa esta función, lo que ocurre es que, al iniciar el proceso de solución del problema de optimización, se encuentran varios caminos por los cuales existen, en el horizonte cercano, un mínimo local para la función objetivo, por lo que esta estrategia permite encontrar múltiples soluciones locales comenzando la búsqueda de la solución desde varios puntos. En la Figura 52 a continuación se muestra cómo se planteará la función multistart dentro del algoritmo de optimización en el controlador MPC. Como se observa, en problemas de optimización no-lineales, donde la convexidad de la funcional de costo no está garantizada, el optimizador es capaz de encontrar un valor mínimo en la función de costo distinto de acuerdo con la condición inicial con la que el procedimiento comienza a realizar la búsqueda. Hay mayor probabilidad en encontrar un mínimo global si se escoge el resultado de menor valor entre las posibilidades encontradas por el procedimiento.



**Figura 52:** Función multistart dentro del algoritmo de optimización en un controlador MPC.

El segundo diseño propone operar el reactor con la restricción de buffering capacity. Ahora el cálculo de las acciones de control, tasa de dilución  $D$ , quedan condicionadas a este requerimiento. Igualmente, que para el anterior caso, se ejecutaron dos versiones, la primera sin la función multistart y la

segunda con la función multistart.

## 5.4 Resultados de simulación y discusión

En esta sección se presentan los resultados de las simulaciones que se llevaron a cabo para evaluar el desempeño del sistema de monitoreo y control mediante la simulación de un sistema con datos reales. Primero se evaluarán los resultados de la estimación de las variables de estado que no fue posible medir directamente dentro del reactor, y luego, se llevará a cabo el mismo procedimiento con los resultados obtenidos de la estimación de las cinéticas de reacción. Luego, se evaluará el desempeño del sistema de control bajo diferentes métricas operacionales. El ordenador que fue usado para llevar a cabo las simulaciones tiene las siguientes especificaciones: Procesador Intel® Core™ i7-1165G7 (12MB Cache). Memoria RAM 8GB (1x8GB) DDR4 3200MHz. Disco sólido SSD 512GB CL35 M.2. Gráficos NVIDIA® GeForce® MX330 2GB GDDR5.

### 5.4.1 Condiciones de simulación

Para realizar la simulación, se usarán los mismos datos que se emplearon en el proceso de identificación paramétrica, tanto para las variables de entrada que caracterizan el influente:  $S_{1in}$ ,  $S_{2in}$ ,  $C_{in}$ ,  $Z_{in}$  como para las condiciones iniciales de simulación de las variables de estado;  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $C$  y  $Z$ , tal y como se muestra en la siguiente Tabla 17.

**Tabla 17:** Condiciones iniciales variables de estado.

	$X_1(0)$	$X_2(0)$	$S_1(0)$	$S_2(0)$	$Z(0)$	$C(0)$
Valor	0.55	0.5	17	3.4	10.7	8
Unidades	[g/L]	[g/L]	[g/L]	[mmol/L]	[mmol/L]	[mmol/L]

La Figura 53 muestra los perfiles de las variables que componen al influente durante los 209 días de experimentación.

### 5.4.2 Observador asintótico

En la Figura 54 se observa el resultado que se obtuvo mediante el observador asintótico para hacer la reconstrucción de la información de las variables de estado  $X_1$  y  $X_2$ .

Para comprobar el desempeño del observador, el valor de la estimación fue comparado directamente con el valor tomado del modelo. Note que la condición inicial del observador fue colocada en un lugar diferente a la del sistema, esto con el objetivo de comprobar que los dos valores convergen en algún momento.

Para el caso de la estimación de las variables  $X_1$  y  $X_2$ , el tiempo de convergencia del valor estimado al valor real (del modelo) fue de alrededor de 60 días. El tiempo de convergencia fue relativamente lento, sin embargo, una vez estuvieron superpuestos estos valores, los dos respondieron de igual

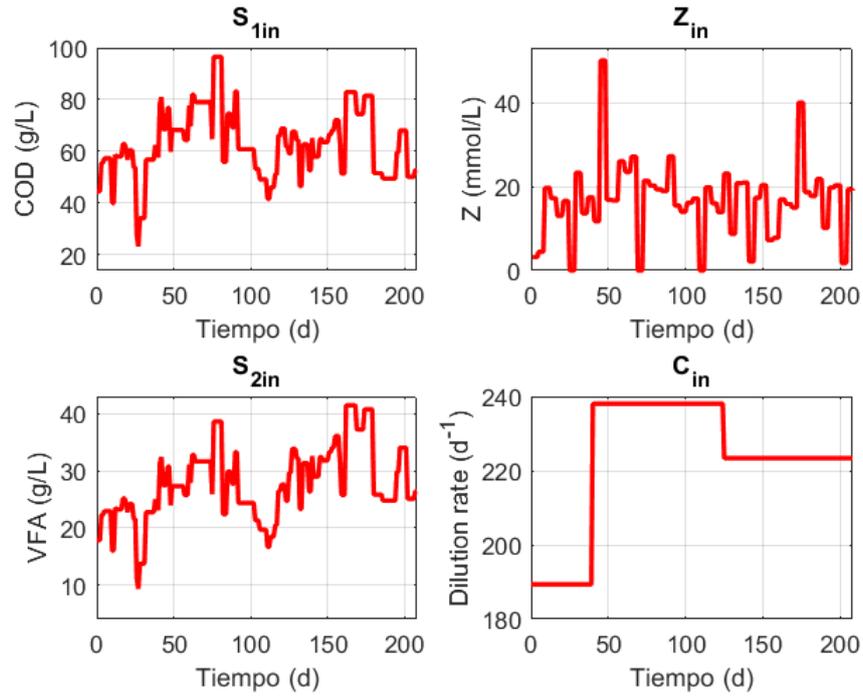


Figura 53: Datos caracterización influente para la simulación.

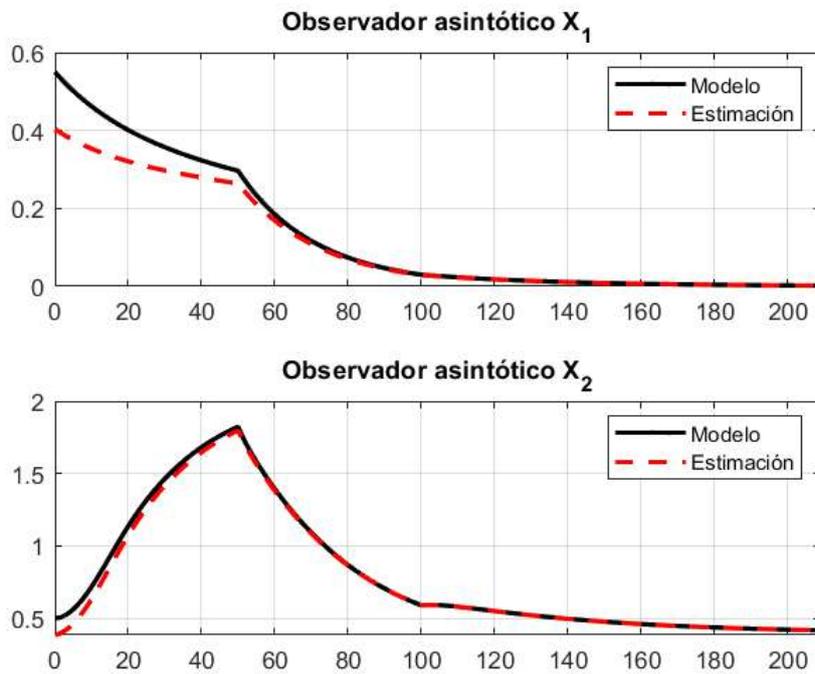
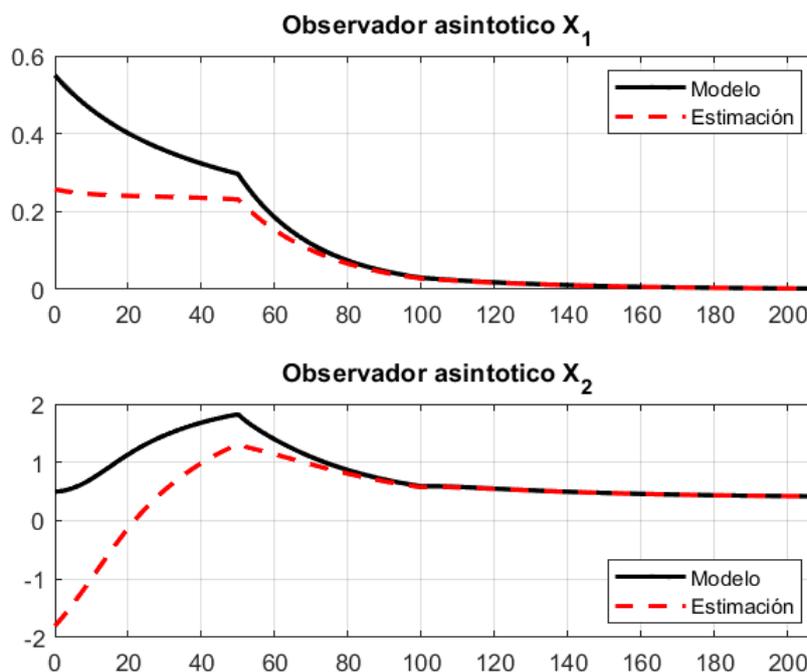


Figura 54: Observador asintótico para la concentración de  $X_1$  y  $X_2$ .

manera ante cambios en el valor de las entradas o perturbaciones que ingresaban al reactor. En la Figura 54 se observa el cambio que se experimenta

en el sistema a los 50 días transcurrida la simulación, hubo un cambio en el valor de la tasa de dilución  $D$  de 0.03 a 0.07. En ese momento se observa que hubo justo un cambio en alguna de las entradas del sistema, ya que se percibe claramente un cambio en la dirección de las dinámicas. Tanto el observador de estados como el sistema responden ante el cambio y continúan con la tendencia de convergencia. Nuevamente, en el día 100 del experimento, la tasa de dilución  $D$  cambia al pasar de un valor de 0.07 a 0.05, sin embargo, debido a que el observado ya había logrado la convergencia, los dos resultados, el observador y las dinámicas del modelo, siguen su comportamiento por igual. Lo anterior demuestra que la calidad en la observación de las variables  $X_1$  y  $X_2$  es muy buena, lo que permite asegurar que la obtención de la información faltante de las variables de estado  $X_1$  y  $X_2$ , a través del uso de un observador, es confiable y por lo tanto, suficiente para soportar la estrategia de estimación de las cinéticas de reacción que se mostrará a continuación.

### 5.4.3 Estimador de cinéticas de reacción

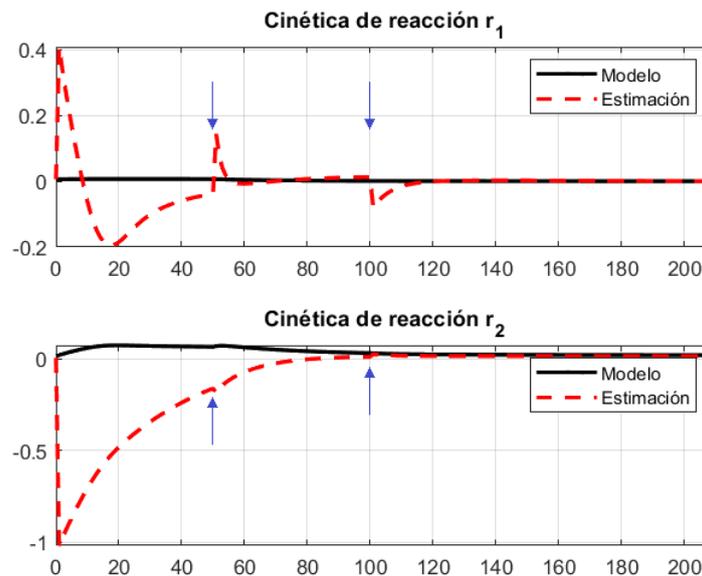


**Figura 55:** Convergencia de las variables  $X_1$  y  $X_2$  estimadas debido al uso de la estructura de estimación de cinéticas de reacción.

En esta sección se evalúan los resultados obtenidos a través de la estimación de las cinéticas de reacción para la mezcla homogénea dentro del reactor. En la anterior sección se presentaron los resultados de un observador asintótico que tenían como objetivo reconstruir la información de las variables de estado  $X_1$  y  $X_2$  que no era posible medir directamente. Hay que recordar que la estimación de las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$  y su convergencia al

valor correcto determinan a su vez la convergencia de la estimación de las variables de estado del modelo completo. Entonces, con los resultados de la estimación de las cinéticas de reacción, es posible reconstruir los estados del sistema para el modelo completo tal y como se observa en la Figura 55.

Ante los mismos cambios realizados por en el valor de la tasa de dilución  $D$ , se observa que tanto las dinámicas medidas como las dinámicas estimadas experimentan un cambio muy pronunciado. Igualmente, las condiciones iniciales para el modelo matemático son muy distintas a las usadas por el estimador. A los 50 días de haber iniciado el experimento se lleva a cabo el primer cambio, a los 100 días se registra el segundo. El tiempo convergencia se mantiene y se posiciona un resultado sobre el otro más o menos a los 65 días de haber iniciado la simulación. Lo anterior demuestra que el estimador de cinéticas de reacción tiene muy buenos resultados ya que este valor es la referencia de qué tan bien se encuentre funcionando la estructura de estimación.



**Figura 56:** Observador asintótico de las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$ .

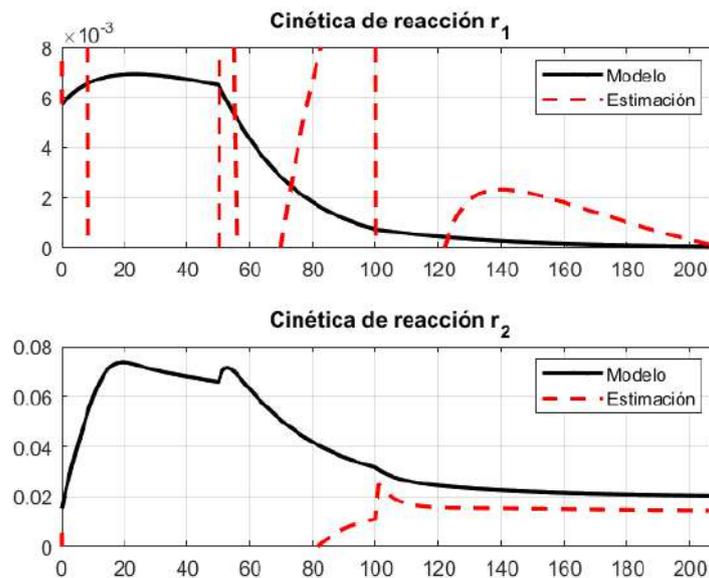
Por otro lado, la Figura 56 muestra el resultado de la estimación de las dos cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$ . Debido a que los estados estimados  $X_1$  y  $X_2$  tuvieron condiciones iniciales distintas con el modelo matemático del sistema, la estimación pierde su orientación súbitamente y trata de converger inmediatamente. Igualmente, se evidencia que a los 50 días, ante el cambio en la tasa de dilución  $D$  de 0.03 a 0.07, la estimación de las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$  se ven perturbadas. Sin embargo, la respuesta es consistente porque inmediatamente se percibe este cambio en las condiciones de operación de nuevo hay una convergencia al valor deseado.

La Figura 57 hace un acercamiento en el rango de valores para el eje Y de los resultados mostrados en la Figura 56. El objetivo es observar con mayor detalle los valores de referencia del modelo, ya que en la Figura 56 no se al-

canzan a apreciar correctamente. El comportamiento natural de los valores de las cinéticas de reacción  $r_1$  y  $r_2$  se observan claramente. En la Figura 57 se observa de qué manera se lleva a cabo el proceso de convergencia, que aunque es lento, este se logra luego de varios días.

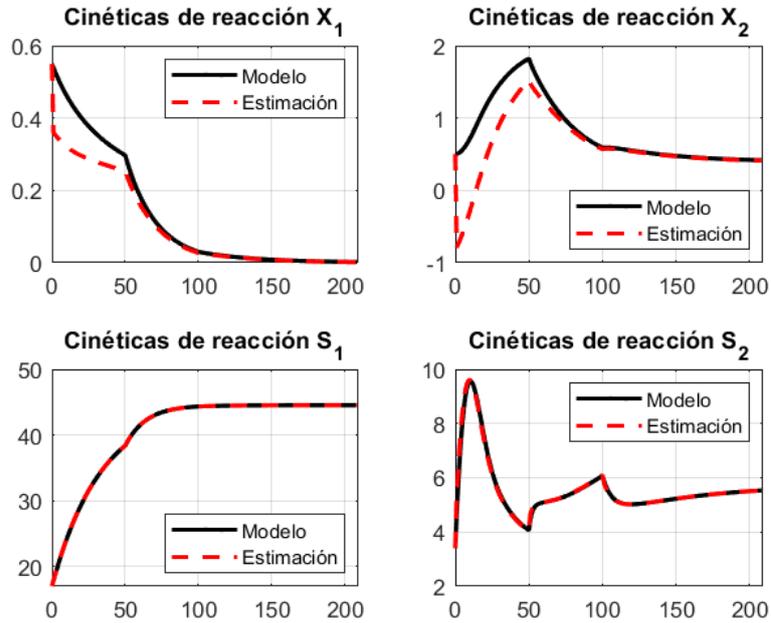
Los resultados de la estimación de todas las variables de estado consideradas se presenta en la Figura 58. Nótese que las variables de estado  $S_1$  y  $S_2$  son medidas directamente, por lo tanto, el resultado de la estimación versus la medición directa es la misma. Sin embargo, para el caso de los estados  $X_1$  y  $X_2$  se observa cómo ocurrió el proceso de convergencia y de qué manera los cambios fueron tolerados, ahora observando también al resto de variables de estado consideradas en el estimador  $S_1$  y  $S_2$ .

Finalmente, en la Figura 59 se muestra el error relativo entre el valor de la estimación y el valor medido de la Figura 58. Se observa que el error relativo para el estado  $X_1$  tiene un comportamiento muy particular, debido a que como el valor del modelo tiende a cero, tan solo una variación muy pequeña cercana a un valor de cero puede llegar a ser muy grande en porcentaje.



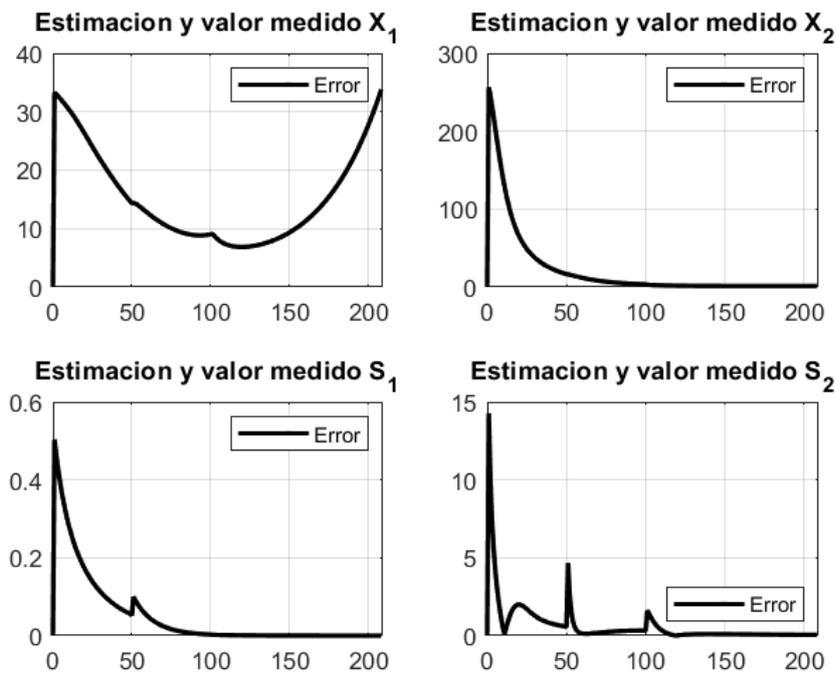
**Figura 57:** Acercamiento a valores de estimación de  $r_1$  y  $r_2$ .

Por esta razón, más allá de los 100 días, el error relativo es tan alto a pesar de que en la Figura 58 se ve que hay una convergencia en estos dos valores. Para el caso de la variable de estado  $X_2$ , al principio el error relativo es muy elevado, sin embargo, a diferencia de lo que ocurrió con el error relativo con la variable  $X_1$ , como el orden de magnitud evaluado era mayor que cero, el error relativo tendió en el tiempo a hacerse cero. Para el caso de las figuras de error relativo de las variables de estado  $S_1$  y  $S_2$ , aunque se ve un error de magnitud considerable casi imperceptible en la Figura 58, la Figura 59 con el correspondiente error relativo muestran que estas variables perciben que el estimador de cinéticas de reacción haya comenzado con una condición



**Figura 58:** Estimador de cinéticas de reacción para las variables de estado.

inicial diferente a la del sistema, y que posteriormente se hayan realizado cambios en los días 50 y 100. Los valores en el error relativo notan las afectaciones anteriormente comentadas.

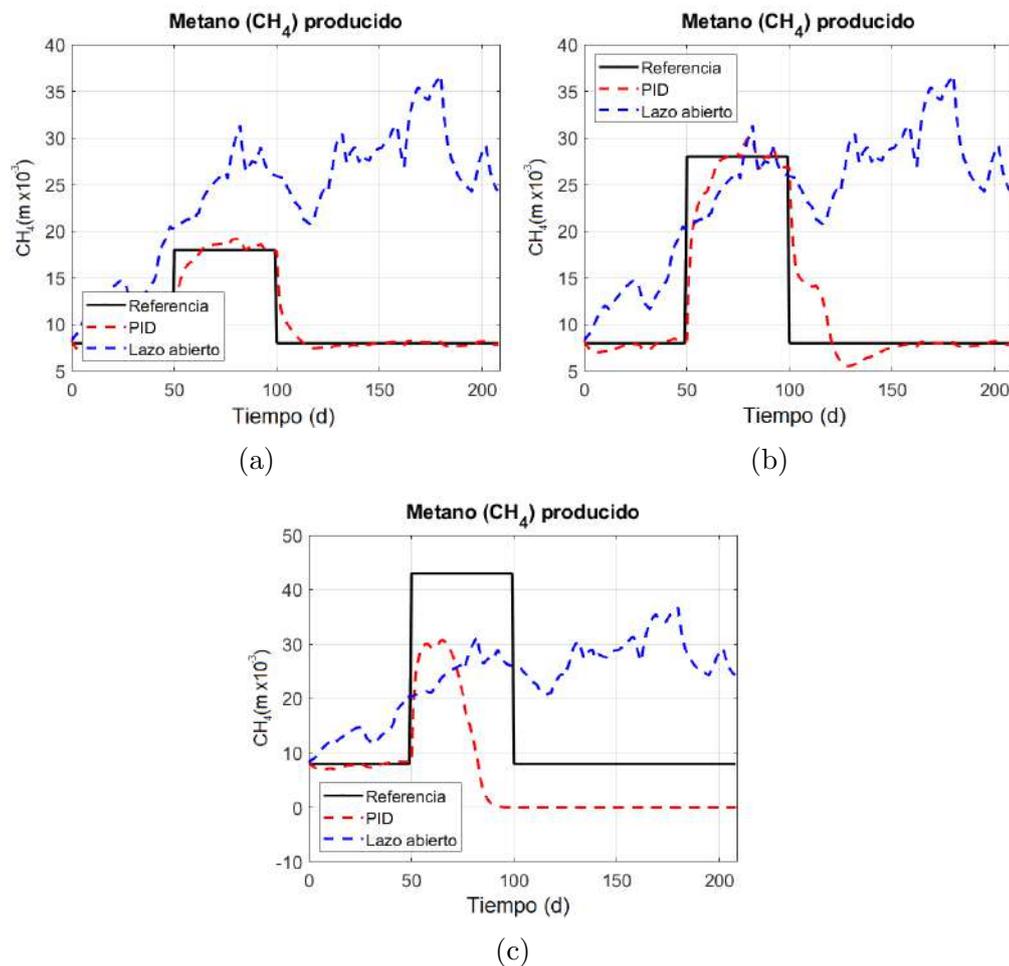


**Figura 59:** Error del estimador de cinéticas de reacción en variables de estado.

En la siguiente sección se presentan los resultados que se obtuvieron de la implementación en simulación del sistema de control sobre la estructura de estimación. Los resultados que se obtuvieron fueron satisfactorios, pues se mejoró el desempeño del reactor de digestión anaerobia en los indicadores de producción de biogás y los contaminantes de los lodos en el efluente.

#### 5.4.4 Desempeño de un Controlador PID tradicional

En esta sección se usa al controlador PID para evidenciar las falencias a las que se enfrenta un controlador tradicional a la hora de operar un sistema de digestión anaerobia en un reactor a nivel industrial. Se usó el toolbox de MATLAB Control System Designer para sintonizar el controlador.

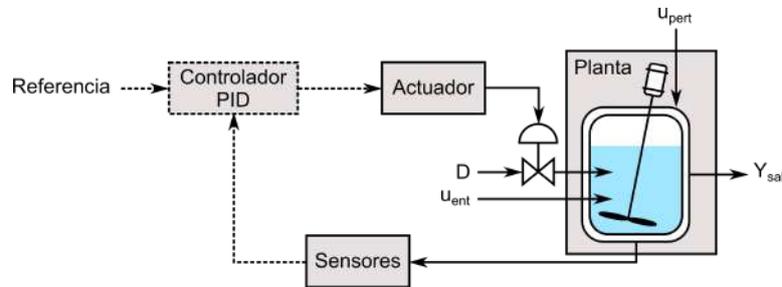


**Figura 60:** Tres perfiles distintos para el seguimiento de referencia de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

En las anteriores figuras se plantea un sistema de control PID con seguimiento de referencias para la producción de metano  $CH_4$ . La Figura 60 muestra una referencia que debe seguir el controlador PID para la producción de metano  $CH_4$ , línea en color negro, y de qué manera el controlador PID se comporta en el objetivo de seguir esta referencia. Para llevar a cabo la prueba se plantea un cambio tipo escalón positivo a los 50 días tras haber

iniciado la simulación y más adelante un escalón negativo a los 100 días. Los cambios en magnitud son diferentes para los tres casos (diferentes perfiles). Como referencia, la línea discontinua en color azul (Lazo abierto), muestra el comportamiento que tuvo la producción de metano  $CH_4$  cuando el sistema se encontraba trabajando con los datos experimentales usados para llevar a cabo el proceso de identificación.

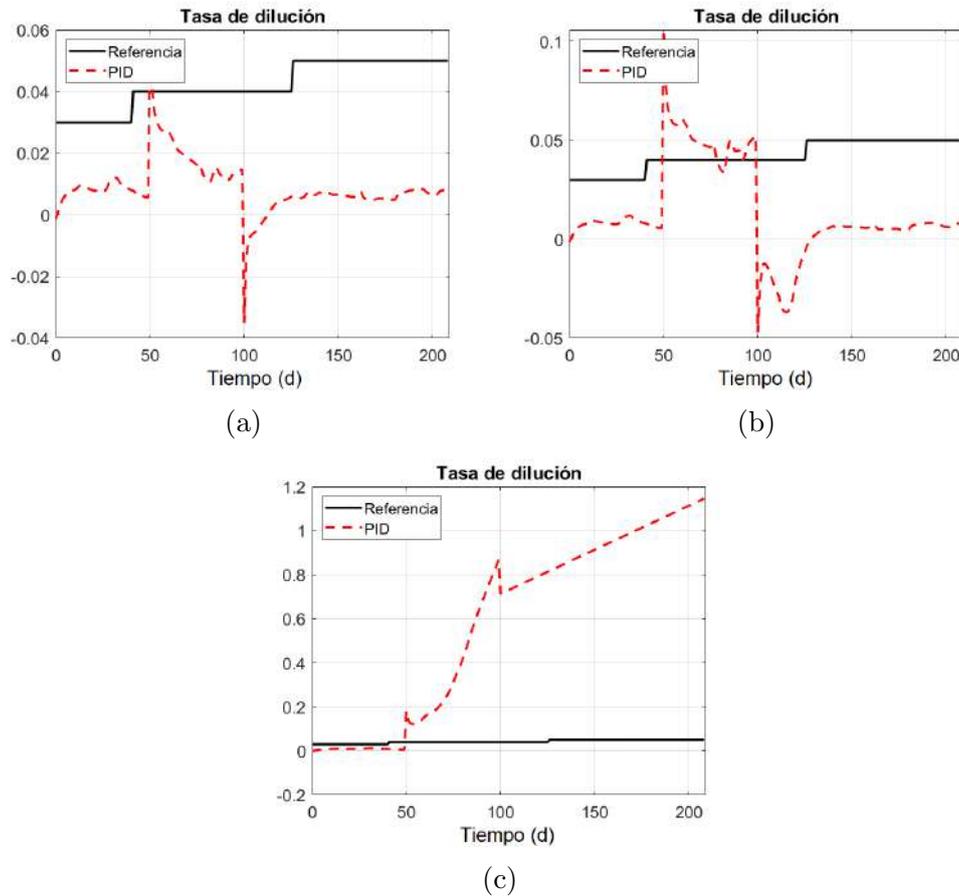
En la anterior Figura (61) se observa el esquema de control PID propuesto para el reactor anaerobio. Se observa que el controlador PID recibe la información de la referencia a la cual el reactor debe operar para producir la cantidad de volumen de metano deseado. La acción de control calculada se lleva al actuador para que esta deje entrar la cantidad correcta de  $D$  al reactor. Como se observa en las Figuras 60a, 60b y 60c, para los tres experimentos, el valor de referencia de producción de volumen de metano  $CH_4$  comienza en el mismo lugar que el usado por la simulación en lazo abierto llevada a cabo en el proceso de identificación paramétrica.



**Figura 61:** Estructura de control PID en reactor anaerobio

El sistema reactor está representado por un modelo no lineal, por lo que la proporcionalidad en las acciones de control tomadas por el dilution rate no se reflejan de manera proporcionada. Esta es una de las razones por las que, ante escenarios de operación de elevadas tasas de producción de metano, que el sistema de reacción homogénea se encuentre cerca de los límites operacionales hace que en cualquier momento el reactor colapse, como se ve en la Figura 62c.

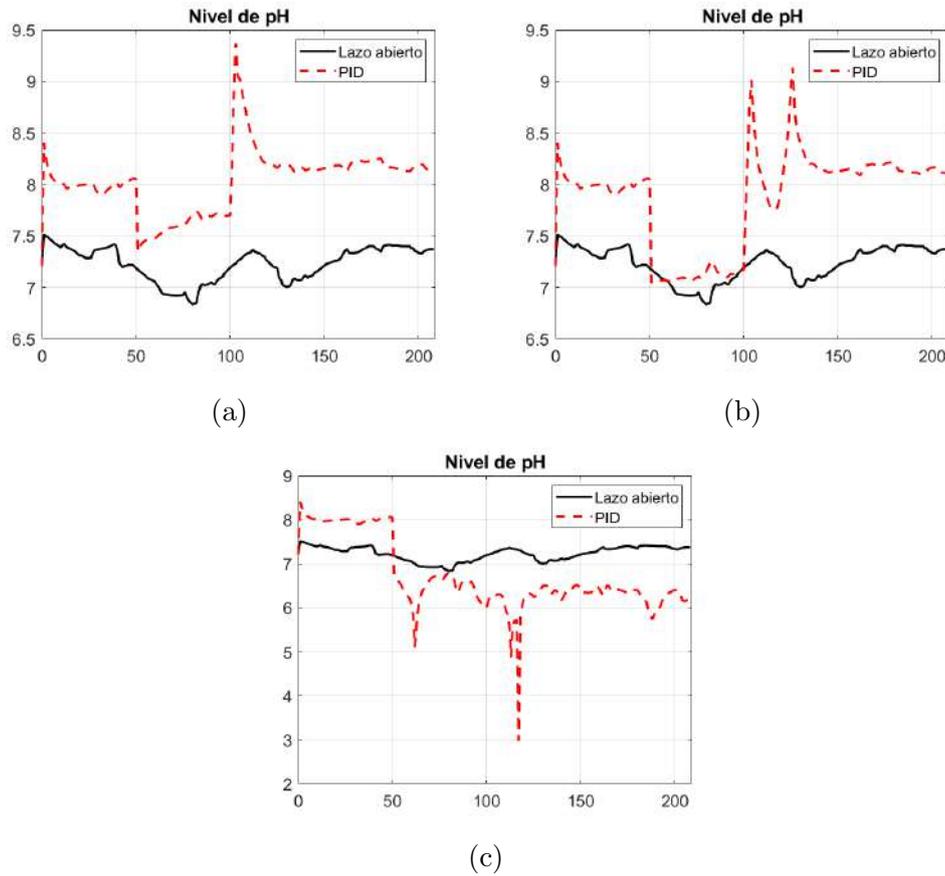
En las tres figuras se observa que la tasa de producción de metano se mantuvo constante (siguiendo la referencia) hasta los 50 días de operación. Se observa para el caso de las Figuras 60a y 60b, que en el momento que se llevó a cabo el cambio en el valor de referencia, hasta los  $18 \text{ m}^3/d$  y  $28 \text{ m}^3/d$ , el controlador PID hace un seguimiento bastante bueno. Sin embargo, para el caso en el que la referencia sube hasta los  $43 \text{ m}^3/d$  en la Figura 60c, el controlador PID reacciona de manera natural en proporción al error entre la referencia y el valor de metano  $CH_4$  producido, pero como estos sistemas no tienen en cuenta la información de operación del sistema, el controlador no pudo seguir la referencia e hizo que el sistema colapsara. Por esta razón, una vez se comenzó a seguir la referencia a mitad de camino, el sistema bajó la producción de metano sustancialmente. Más allá del día 100 de simulación, aunque la referencia haya bajado a su nivel anterior, el sistema no fue capaz de recuperarse, lo que demuestra la importancia de que en este tipo de sistemas es fundamental vigilar el estado de salud operativa dentro



**Figura 62:** Resultados tasa de dilución en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

de la mezcla homogénea. Esto comprueba que los fenómenos físico-químicos y biológicos del metabolismo bacteriano en algunos casos son irreversibles. La Figura 62 muestra los valores calculados de tasa de dilución  $D$  por el controlador PID cuando este llevó a cabo el proceso de seguimiento de referencia para los tres casos.

Se observa como referencia la línea en color negro que son los valores de tasa de dilución  $D$  que se usaron para llevar a cabo el proceso de identificación paramétrica (que generaron la referencia de producción de metano  $CH_4$  mostrada en línea discontinua azul en la Figura 60). Las Figuras 62a y 62b muestran que los valores calculados por el controlador PID para la tasa de dilución  $D$  son factibles hasta los 100 días de operación. A los 50 días se produce un cambio coherente en estos valores, debido a que el controlador PID reacciona proporcionalmente ante los cambios en el error entre la referencia y el valor del volumen de metano producido. En este momento, el valor de la tasa de dilución sube súbitamente y luego se regula. Sin embargo, a los 100 días se produce un cambio en el valor de la referencia nuevamente que intenta llevar al sistema a su estado anterior, en ese momento es cuando la tasa de dilución toma valores negativos, lo cual significa que el sistema entra en zonas de operación no factibles, lo que corrobora que este tipo de sistemas con tecnología tradicional no son capaces de operar de manera semiautónoma. Para el caso de la Figura 62c, luego de

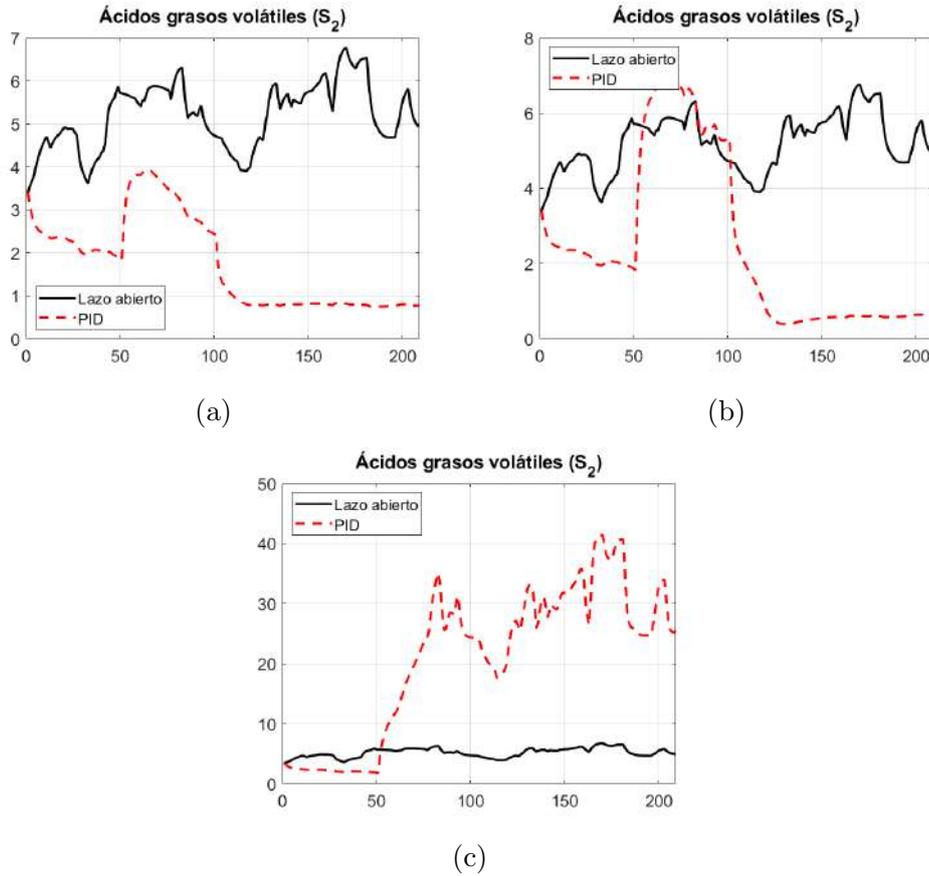


**Figura 63:** Resultado nivel de  $pH$  en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

que la referencia cambiara hasta los  $43 \text{ m}^3/d$  para la cantidad de volumen de metano producido como referencia a los 50 días, se muestra que el valor de la tasa de dilución toma valores incorrectos muy rápidamente. Como se observó en la Figura 60c, incluso con el valor incorrecto de tasa de dilución mostrado, el controlador PID no fue capaz de seguir la referencia.

La Figura 63 muestra el valor en el nivel de  $pH$  que resultó para cada uno de los tres casos. Se observa igualmente que luego de los 100 días de operación el sistema entra en regiones no factibles de operación. Los cambios se toleran para el primer cambio en el valor de la referencia a los 50 días. En las Figuras 63a y 63b, los valores en el  $pH$  se incrementan considerablemente hasta sobrepasar las 9 unidades a los 100 días de operación. Sin embargo, en el caso de la Figura 63c, el valor en el nivel de  $pH$  toma una dirección contraria. El valor del  $pH$  llega en algún momento hasta las 3 unidades.

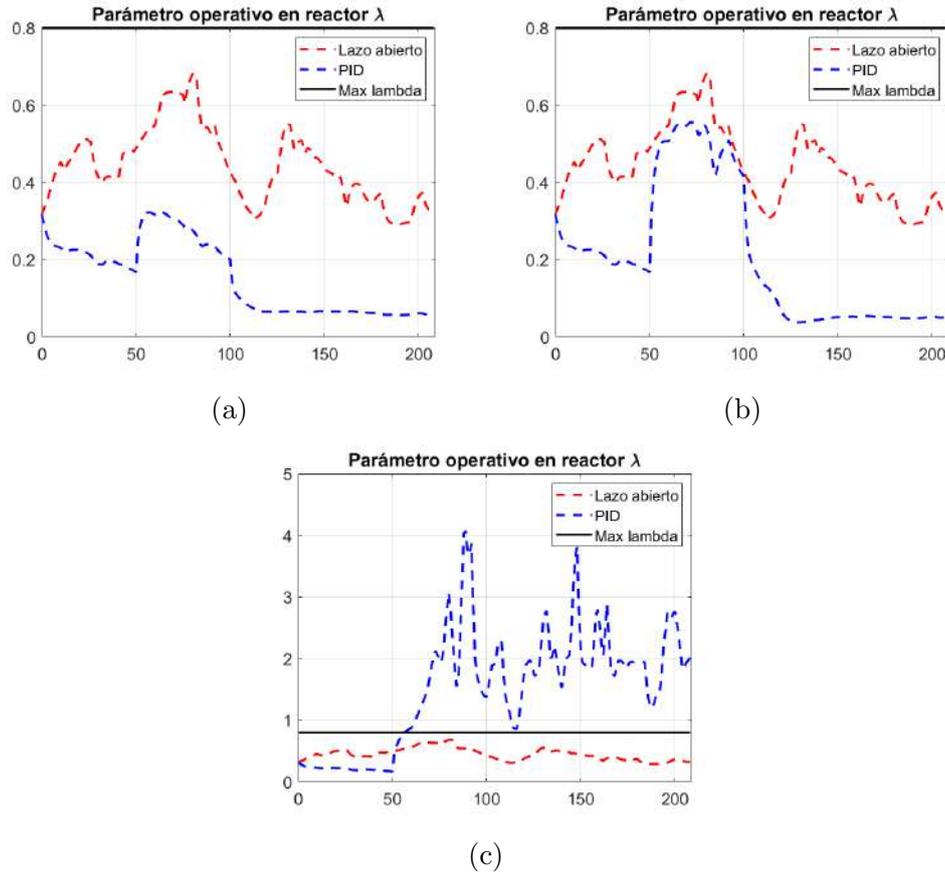
Asimismo, la Figura 64 muestra el valor de acidez o  $S_2$  en el sistema durante todo el tiempo de simulación. La línea en color negro es el valor de  $S_2$  que se obtuvo para el caso lazo abierto (referencia). Las Figuras 64a y 64b muestran que hasta los 100 días hubo una operación relativamente factible por parte del sistema, los valores de acidez de la mezcla homogénea se muestran por debajo del valor de referencia. Para la Figura 64b se observa que este valor sobrepasa la referencia a los 50 días de operación. De ahí en



**Figura 64:** Resultados ácidos grasos volátiles ( $S_2$ ) en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

adelante, este valor no corresponde con un perfil de operación normal para un reactor de digestión anaerobia.

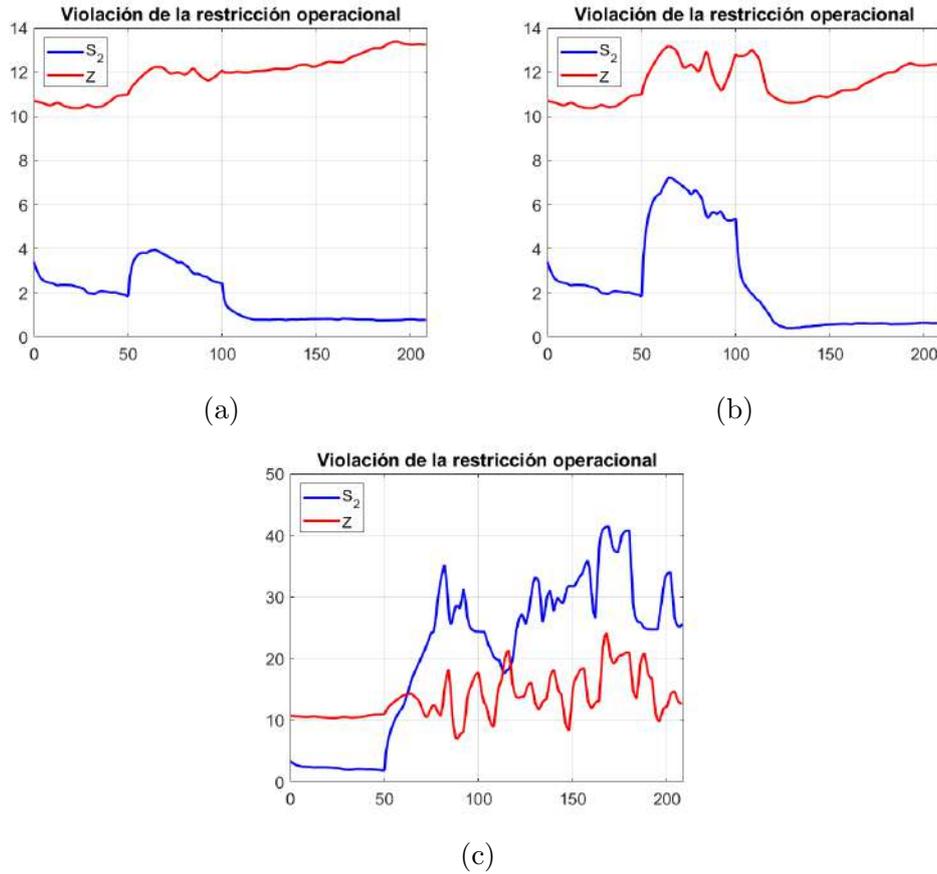
La Figura 64c muestra que una vez a los 50 días se produce el cambio de referencia en el nivel de metano  $CH_4$ , el valor de acidez en la mezcla homogénea se dispara a valores no factibles de operación. En ese momento las bacterias entrarán en estado de inhibición, lo que hace que el sistema salga de operación y el nivel de producción de metano  $CH_4$  baje su producción considerablemente. La Figura 65 muestra el valor que se obtuvo de la variable  $\lambda$  para los tres casos. La línea discontinua en color rojo muestra la referencia que fue usada  $\lambda$  para el caso en que el sistema operó con los datos que se usaron para la optimización paramétrica en el anterior capítulo. El valor de  $\lambda$  en la Figura 65a no sobrepasa el valor de  $\lambda$  de referencia durante todo el tiempo de simulación. Sin embargo, para el caso de la Figura 65b, este valor se acerca en el momento en que el sistema se acidifica considerablemente, que es cuando la referencia que debe seguir el controlador PID sube rápidamente a los 50 días. Lo anterior tiene sentido, en cuanto se lleva a que el sistema produzca una gran cantidad de metano de manera súbita. Luego de los 100 días, cuando la referencia vuelve y toma su valor anterior, el valor de  $\lambda$  cae a niveles, incluso por debajo de los mostrados al inicio en la Figura 65a. La Figura 65c presenta un comportamiento esperado para esta variable, debido a que el cambio en la referencia a los 50 días no es



**Figura 65:** Resultados valor de  $\lambda$  en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

tolerado por el sistema frente a los cambios que hace el controlador PID. El valor de  $\lambda$  sube hasta casi las 4 unidades, lo que indica que el nivel de acidez está muy por encima del valor de la alcalinidad. Este valor no baja del umbral límite 0.8 (línea en color negro) hasta el final de la simulación. Finalmente, la Figura 66 muestra el valor por separado de las dos variables que determinan el comportamiento del parámetro  $\lambda$ . Como se clarificó anteriormente, la capacidad de tolerar una mayor cantidad de acidez, cuando se necesita incrementar el nivel de producción de metano, que es el buffering capacity, exige que el reactor se encuentre en niveles operativos relativamente normales. El valor de acidez de la mezcla homogénea  $S_2$  tiene que estar por debajo del nivel de alcalinidad  $Z$ . Las Figuras 66a y 66b muestran un comportamiento en el que el sistema podría tolerar las decisiones que toma el controlador PID, sin embargo, en la Figura 66c se observa que luego de los 50 días, esta relación acidez y alcalinidad no se cumple, lo que hace que el nivel de acidez de la mezcla dentro del reactor aumente considerablemente y sea muy elevada.

Como se observó en los anteriores resultados, el controlador PID no tiene la capacidad de gestionar la operación de un reactor de digestión anaerobia. Los cambios en la operación fueron relativamente de baja complejidad, lo que confirma que los sistemas de control basados en MPC son una muy



**Figura 66:** Resultados de la restricción operacional en el seguimiento de tres referencias de producción de flujo de metano ( $CH_4$ ) en un controlador PID.

buena alternativa.

#### 5.4.5 Controlador MPC para digestión anaerobia

Una gran cantidad de experimentos se llevaron a cabo para validar la eficacia de los controladores propuestos. Como se explicó en la anterior sección, se diseñaron dos controladores, uno sin restricciones operativas y otro con las restricciones. Cada una de las dos propuestas se programó con y sin la función multistart. Los resultados se muestran a continuación.

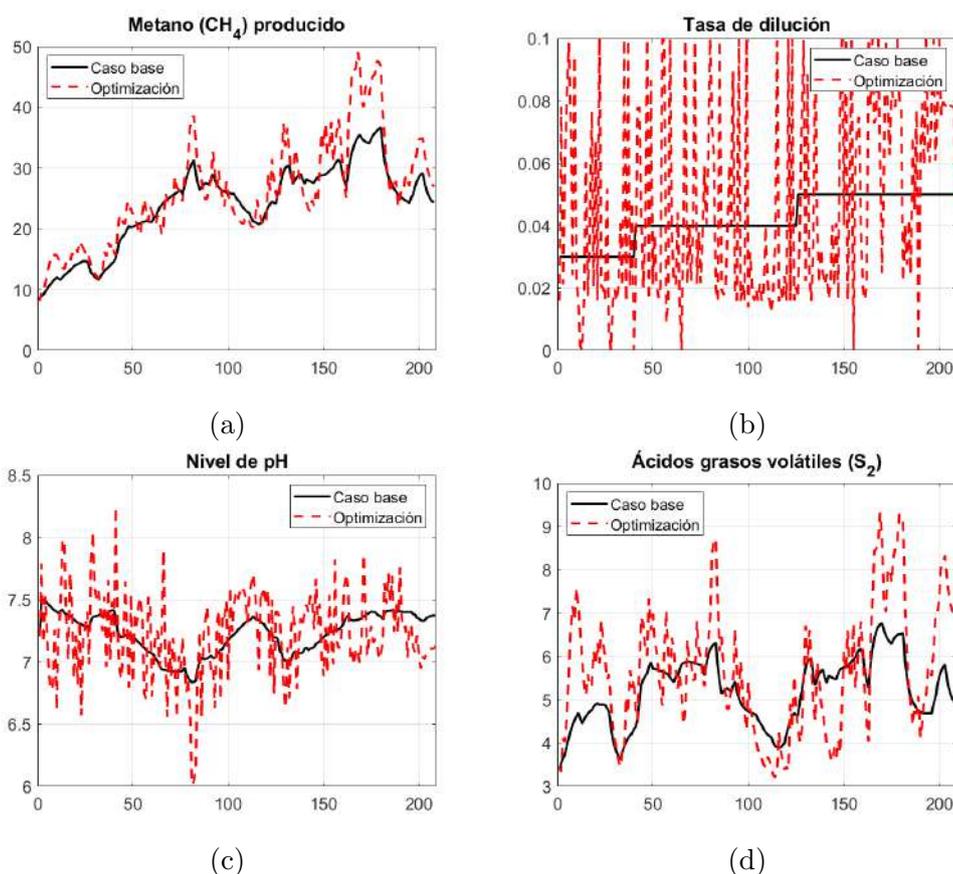
##### Controlador MPC sin restricciones

###### Sin función multistart

Las Figuras 67 y 68 muestran el resultado que se obtuvo luego de que el controlador MPC calculara las acciones de control (tasa de dilución  $D$ ) sin la restricción de buffering capacity  $\lambda$ .

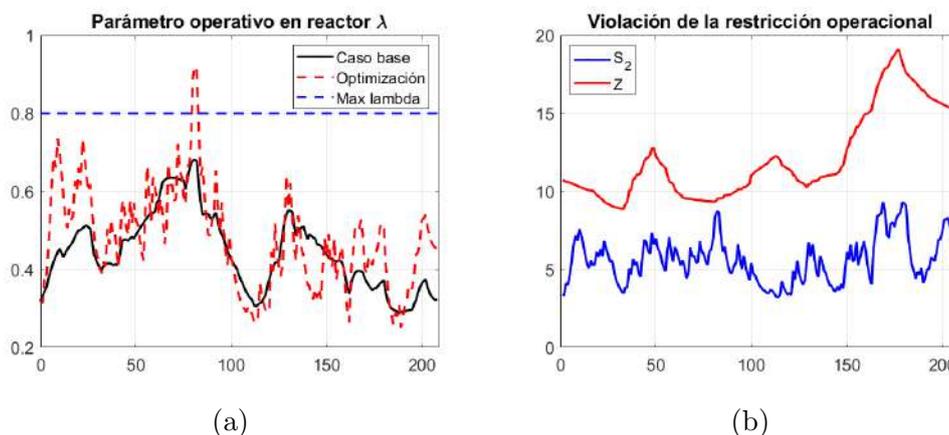
La Figura 67a muestra la comparación del volumen de producción de metano entre el caso base (sin controlador en línea negra) y el caso controlado por el MPC (optimización en línea roja discontinua). Cabe aclarar que

el caso base, sin controlador, es una simulación del sistema con la tasa de dilución  $D$  preestablecida en el experimento y usada en las secciones anteriores. Asimismo, la Figura 67b muestra la tasa de dilución  $D$  del caso base (línea en color negro) y el valor de la tasa de dilución  $D$  que calculó el controlador MPC (en línea en color rojo discontinua). La variable  $D$  es el grado de libertad que tiene el sistema para lograr el objetivo de maximizar la producción de metano que se observa en la Figura 67a. Los cambios son muy variables dentro de una banda de valores que comprende entre 0 y 0.1, sin embargo, se demuestra que se consigue un aumento en el rendimiento del reactor. En la Figura 67c se observa que la tendencia se marca igualmente para el caso del valor en el nivel del pH, donde las oscilaciones son muy grandes, sin embargo, se encuentran dentro de una banda de operación correcta. Solo en algunos momentos puntuales este valor se acerca a 6 o sobrepasa momentáneamente a 8. Es claro que en algunos momentos, los valores en el nivel de pH corresponde con valores elevados en el nivel de acidez,  $S_2$ . Se observa en la Figura 67d que alrededor de los 80 días el valor de  $S_2$  crece súbitamente, y a su vez, el valor del nivel de  $pH$  decrece a su nivel más bajo en la Figura 67c.



**Figura 67:** Resultados del controlador MPC sin restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

Por otro lado, la Figura 68a muestra el valor del parámetro  $\lambda$  durante todo el tiempo de simulación. Hay que recordar que esta simulación se llevó a cabo sin una restricción explícita sobre este indicador, por lo tanto, como



**Figura 68:** Resultados del controlador MPC sin restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

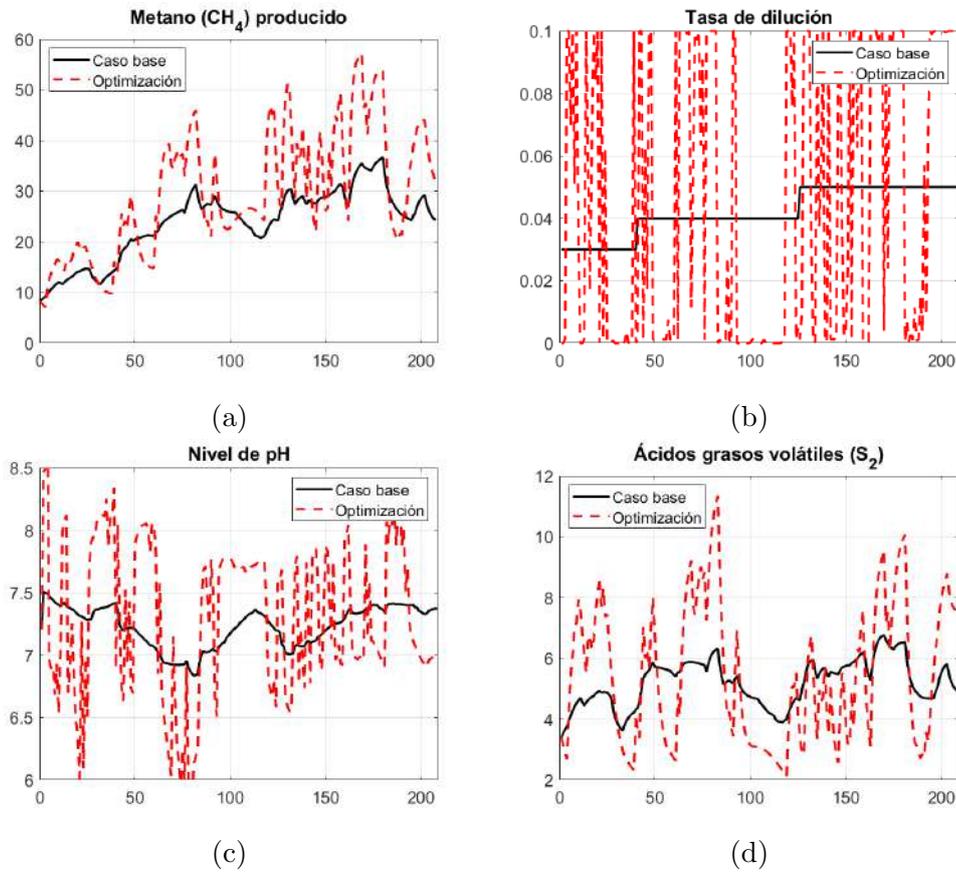
se observa en la figura, en algunos momentos hay un valor límite que se sobrepasa, que es 0.8, el cual, según la literatura [34, 15], una operación dentro de los límites deseados ocurre cuando  $0.1 \leq \lambda \leq 0.8$ . Por esta razón hay una línea discontinua de color aún en el valor superior. Los resultados muestran una oscilación mayor de parámetro respecto caso base, pues en el caso base, la tasa de dilución  $D$  tiene solo tres cambios en forma de escalón. Por su parte, la Figura 68b muestra los valores por separado del nivel de acidez  $S_2$  y alcalinidad dentro de la mezcla  $Z$ . La línea azul (el valor de  $S_2$ ) por debajo de la línea en color rojo (el valor de  $Z$ ) muestra la capacidad de tolerancia a la acidez a la que trabaja el sistema. Esta figura muestra el estado de salud operativa del sistema. Se demuestra que en todo momento no hay una saturación alrededor de poder soportar un mayor nivel de acidez si se llegara a necesitar para producir una mayor cantidad de metano  $CH_4$ .

### Con función multistart

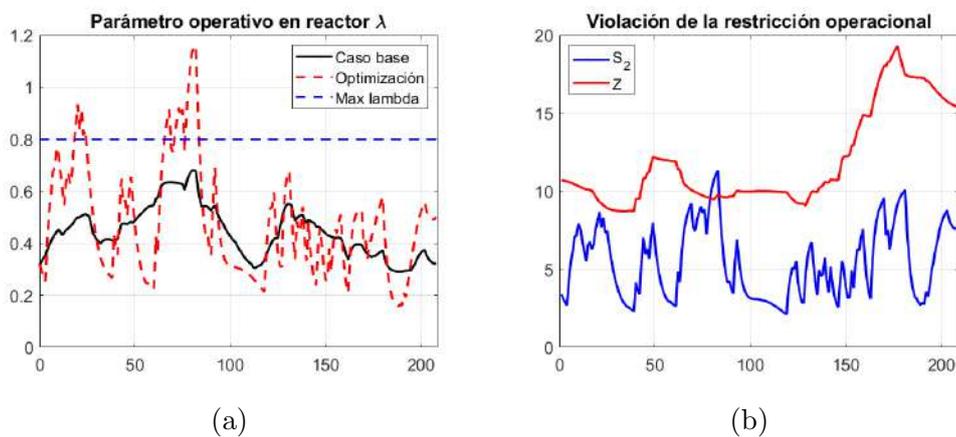
Por otro lado, las Figuras 69 y 70 muestran los resultados del mismo esquema de control ahora con la función multistart dentro de la programación, el cual tiene un mayor rendimiento. La Figura 69a muestra un mayor volumen de metano producido (ver la línea en color rojo discontinua).

El valor de la tasa de dilución  $D$  es mucho más oscilante (ver Figura 69b), oscila entre los extremos de los valores límite 0 y 0.1. El nivel de  $pH$  igualmente cambia mucho (ver Figura 69c) debido a este comportamiento, con valores extremos de 8.5 y 6. Aquí se sobrepasan los límites superiores e inferiores adecuados con mayor frecuencia, sin embargo, como también se observa en la Figura 69d, se debe a que el valor de acidez tiene grandes variaciones durante todo el tiempo de simulación. En la Figura 70a, se observa que el valor del parámetro  $\lambda$  sobrepasa el límite de 0.8 y además este valor supera el límite máximo 1. Lo anterior se explica con la Figura 70b, en donde el valor de la alcalinidad  $Z$  supera al valor de  $S_2$ , lo que quiere decir que el nivel de buffering capacity se pierde totalmente, llevan el sistema a no tolerar más cantidad de ácidos en el influente y prácticamente

llevan el sistema a no ser operativo debido a que la materia orgánica siempre contiene acidez.



**Figura 69:** Resultados del controlador MPC sin restricciones con multistart en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.



**Figura 70:** Resultados del controlador MPC sin restricciones con multistart en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

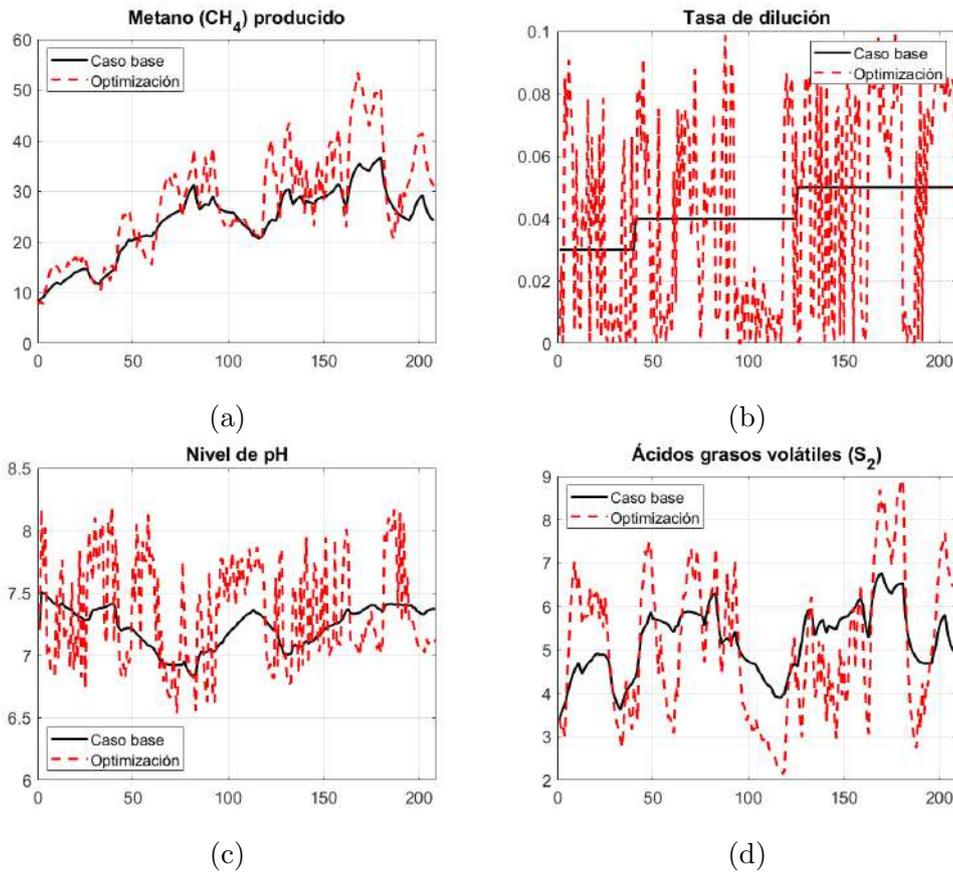
Con los anteriores resultados es claro que se puede aumentar la producción de metano, incluyendo algoritmos de búsqueda global como el multistart. Sin embargo, para lograr esto se requiere llevar el sistema al límite de los

valores de operación factible. Por lo tanto, es necesario incluir restricciones operativas, la cual es una de las propiedades más importantes del MPC.

### Controlador MPC con restricciones

#### Sin función multistart

A continuación, se muestran los resultados de la simulación, que incluyen la restricción operacional sobre el término  $\lambda$ .

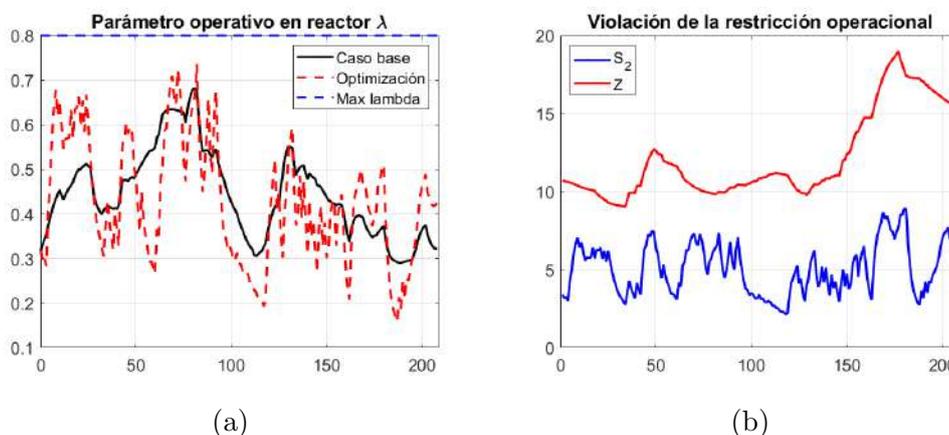


**Figura 71:** Resultados del controlador MPC con restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

Aquí, se ha establecido que esta no debe sobrepasar el valor de 0.8, por esta razón, los valores calculados de la tasa de dilución  $D$  cuidan mucho más la operación continua del sistema. Las Figuras 71 y 72 muestran los resultados del MPC con esta restricción. Como se observa, a pesar de la restricción, el valor de metano  $CH_4$  producido es mayor que el caso base, ver Figura 71a. Las oscilaciones en el valor de la tasa de dilución  $D$  calculada son menores debido a que el sistema se encuentra restringido a hacer los cálculos basados en la salud operativa del sistema, ver Figura 71b.

La Figura 71c muestra el nivel de  $pH$  en donde nuevamente se evidencia que es mucho más oscilante que el caso base, sin embargo, va y viene sobre los extremos permitidos sin casi sobrepasarlos. En la Figura 71d se observa

igualmente los cambios en el valor de acidez. Las dos líneas tienen la misma tendencia, sin embargo, la línea de color rojo se incrementa más o se reduce más en magnitud ante los mismos cambios del caso base. Esto se debe a que el sistema de control se lo permite porque justo hasta ese punto el sistema de reacción homogénea dentro del reactor estará dentro de los límites operativos.



**Figura 72:** Resultados del controlador MPC con restricciones en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

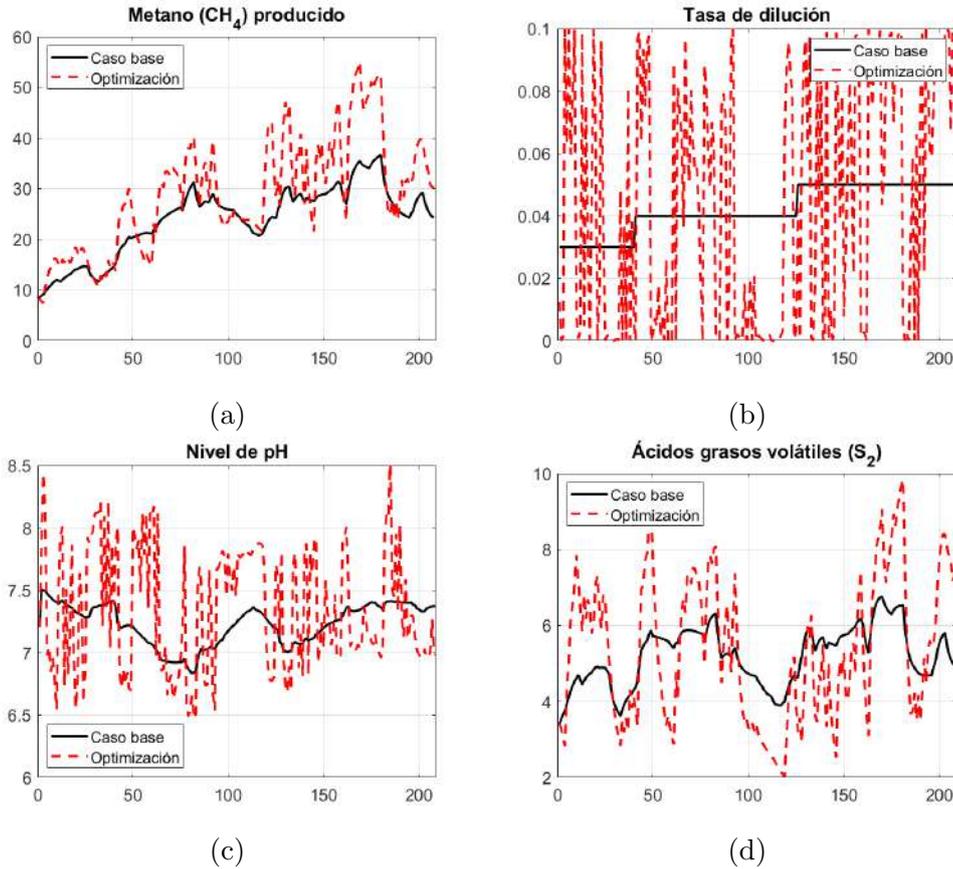
La Figura 72a muestra una clara reducción en el valor de  $\lambda$  durante todo el tiempo de simulación. La línea en color rojo discontinua se regula mucho más y se llega a parecer más a la línea en color negro. Lo más importante, es que en ningún momento se violó la restricción para alcanzar el objetivo de maximizar la producción de metano. La Figura 72b muestra que siempre hubo margen en el buffering capacity de absorber una mayor cantidad de ácidos. La relación se mantuvo lo suficientemente distante todo el tiempo para permitir que el sistema aumente el nivel de acidez si encontraba factible producir una mayor cantidad de volumen de metano. En la siguiente y última prueba se presenta una mejora del desempeño del sistema de control agregando al algoritmo la función multistart.

### Con función multistart

Las Figuras 73 y 74 muestran la capacidad de producción de volumen de metano ahora con la función multistart dentro del algoritmo de optimización. Como se observa en la Figura 73a la línea en color rojo discontinua es mucho mayor que la línea negra del caso base.

A pesar de que la oscilación en el valor de la tasa de dilución  $D$  (ver Figura 73b) se había reducido en la anterior simulación, ahora volvió esa tendencia nuevamente, sin embargo, si hay garantía de que los límites operacionales son correctos. El valor en el nivel de  $pH$  ahora no sobrepasa por debajo el valor de 6.5, ver Figura 73c. Por otro lado, el valor de los ácidos  $S_2$  de la Figura 73d tienen una forma muy parecida a la Figura 71d.

La Figura 74a muestra que los valores límites permitidos nunca fueron superados, pero en algunos momentos este valor estuvo muy cerca del límite. Lo interesante es que, en este momento, el sistema tenía margen para hacerlo. En la Figura 74b se observa que, aunque las dos líneas están más cerca una de la otra, a diferencia de la Figura 72b, nunca la línea en color azul (valor de  $S_2$ ) superó a la línea en color rojo (valor de  $Z$ ).



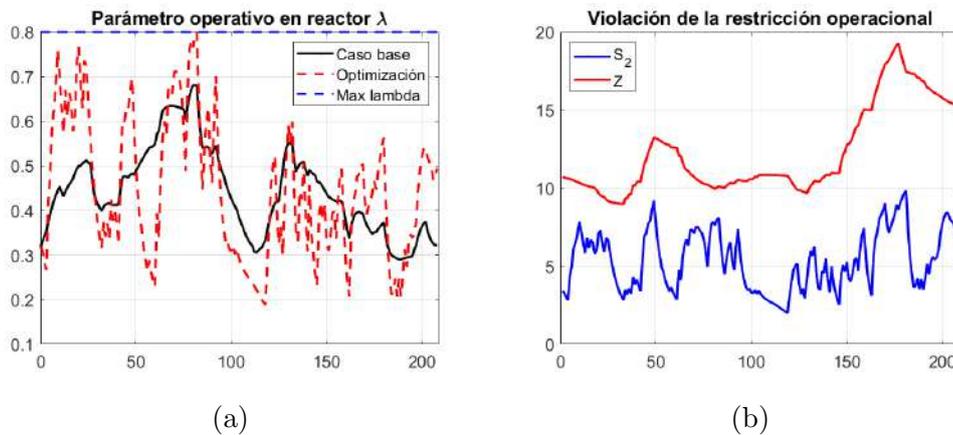
**Figura 73:** Resultados del controlador MPC con restricciones con multi-start en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

**Tabla 18:** Mejora en el rendimiento en la producción de metano  $CH_4$  para cada uno de los esquemas de control MPC propuestos.

	Sin restricciones		Con restricciones	
	Sin multistart	Con multistart	Sin multistart	Con multistart
% Mejora	17.40	24.41	18.82	20.85

Los resultados del desempeño del controlador para los diferentes casos se resume en la Tabla 18. Aquí se observa las mejoras los cuatro esquemas de control MPC propuestos en esta sección. La referencia de comparación es el caso base; el perfil de entradas que se usaron en el experimento original para llevar a cabo el proceso de identificación paramétrica, en el que el valor de la tasa de dilución  $D$  tuvo tres valores diferentes en una forma de gráfica tipo escalón. Note que para el caso en el que el controlador MPC fue propuesto

sin restricciones en la operación usando el parámetro  $\lambda$ , las mejoras que se lograron fueron de un 17.40% y un 24.41% sin usar y usando la función multistart respectivamente. Para el caso de los controladores MPC con la restricción en la operación del parámetro  $\lambda$ , las mejoras fueron de 18.82% y un 20.85% sin usar y usando la función multistart respectivamente. Es muy interesante resaltar que si comparamos el controlador MPC sin restricciones y con restricciones cuando se introduce la función multistart, el rendimiento es menor para el último caso. Esto se debe a que el parámetro  $\lambda$  condiciona la producción de metano a un mantenimiento de la operatividad del sistema, evitando que este entre en inhibiciones o pérdida sustancial de concentración de microorganismos.



**Figura 74:** Resultados del controlador MPC con restricciones con multistart en la maximización del flujo de metano ( $CH_4$ ) producido.

## 5.5 Resumen

A lo largo de este capítulo se documentó la manera en que fue posible plantear una estructura de monitorización y control que funcione. Los inconvenientes que se solucionaron fueron los siguientes. La correcta selección del modelo matemático AM2 modificado permitió plantear un algoritmo que hizo posible estimar las variables de estado que no era posible medir, que eran las concentraciones de bacterias acidogénicas  $X_1$  y arqueas metanogénicas  $X_2$ . También fue posible estimar las cinéticas de reacción dentro de la mezcla homogénea que describen el grado de evolución de los procesos de acidogénesis y metanización. Esto le permitió al modelo matemático adquirir un grado de sensibilidad mayor a los planteados tradicionalmente debido a que se pasó de tener parámetros estáticos para describir este efecto a parámetros dinámicos. Fallas en la operación de los sistemas de monitorización y control citados en la literatura [15], se atribuían a dejar estos parámetros constantes en una materia orgánica que ingresa por el influente y cambia todo el tiempo.

Al final, lo más importante es que todo lo anterior permitió proponer el montaje del sistema de monitoreo y control basado en MPC sobre una estructura coherente; en la que la falta de mecanismos de medición, debido a

la ausencia de sensores, fue superada con el desarrollo de algoritmos de estimación de estados y cinéticas de reacción, en la que los problemas asociados a los comportamientos no linealidades se superaron con el uso de modelos para propósitos de control con baja carga computacional, a los que se le adicionaron mayor sensibilidad mediante la estimación de las cinéticas de reacción, que anteriormente se consideraban estáticas. En comparación con los sistemas de control tradicionales, los controladores PID, se corroboró que estos no eran capaces de operar estos sistemas debido a que no tienen en cuenta las condiciones físicas y de operación mínimas para que el reactor evite funcionar en puntos no factibles. El rendimiento de los sistemas de control MPC fue muy superior. Además, en todo momento permitieron vigilar las restricciones tanto físicas como operacionales.

---

## 6 Conclusiones

Este capítulo resume los resultados que se obtuvieron como solución al problema de investigación planteado en esta tesis. Dentro del proceso metodológico, se propuso una hipótesis de investigación que para ser validada requirió la ejecución de una serie de actividades que se realizaron con base en unos objetivos específicos. Como resultado de esta investigación, se demostró que es posible construir un sistema de control para biodigestores anaerobios basado en un modelo matemático, que solucione los retos que a día de hoy impiden dar pasos hacia el escalado de estos sistemas a nivel industrial. En este sentido, el sistema de control toma decisiones oportunas sobre el reactor, gracias al adecuado modelado de estos sistemas de reacción homogénea y a la predicción de escenarios a futuro que evitan una inadecuada operación del sistema.

A continuación, se resumen las conclusiones que se obtuvieron en los sucesivos capítulos. Estos resultados son discutidos con el fin de avanzar hacia la implementación de sistemas robustos de control para reactores de digestión anaerobia. Al final se muestran las contribuciones científicas que se realizaron a lo largo de estos años de investigación.

### 6.1 Resumen de las conclusiones

Uno de los principales resultados obtenidos en el desarrollo de esta tesis fue el diseño y puesta en marcha mediante simulación de un sistema de monitorización y control, basado en optimización, que utilizó una estructura de observadores para estimar variables que no era posible medir directamente. Aquí, se demostró que esta propuesta operó correctamente un reactor de digestión anaerobia y mejoró sustancialmente los niveles de producción de metano. Para poder lograr este propósito, fue necesario resolver varios retos, los cuales se presentan a continuación. En el capítulo 3, se modificó el modelo AM2, que fue seleccionado de la literatura, en donde se adicionaron dos términos que tuvieron como objetivo incluir un más amplio espectro de materiales orgánicos que contengan proteínas y aminoácidos tanto para su degradación; responsables de que el valor de la alcalinidad cambie en el tiempo. Originalmente, solo se podía trabajar con material orgánico que no

tuviera estos componentes. Esto reducía considerablemente la capacidad de instalación de sistemas de control en reactores anaerobios debido a que podía ser usado en un conjunto menor de tipos de materiales orgánicos. En el capítulo 4 se presentaron los datos reales que se midieron luego de llevar a cabo una experimentación en un reactor de digestión anaerobia de 150 litros durante 338 días en rango termofílico. Ante el reto de obtener datos directamente de un sistema anaerobio real, un problema de optimización fue planteado con el objetivo de encontrar los parámetros que hicieran que el modelo matemático se ajustara a los datos experimentales. Se usó el algoritmo step-ahead que mejoró los resultados respecto a la alternativa de algoritmos genéticos. Finalmente, todo lo anterior permitió en el capítulo 5, formular una estructura de estimación que logró estimar tanto los valores de las variables de estado que no se pudieron medir directamente, como también estimar el grado de avance de las reacciones de acidogénesis y metanogénesis al lograr obtener los correspondientes valores de las cinéticas de reacción. Lo anterior representó un aporte importante debido a que hasta el momento se consideraban a estos parámetros estáticos en la mayoría de trabajos de investigación, lo que implicaba un detrimento en el desempeño de los controladores MPC y la razón por la cual no funcionaran adecuadamente. Adicionalmente, en este capítulo, se hizo el montaje de una estructura de control MPC que trabajó con toda la información de las mediciones y estimaciones en tiempo real que se necesitaron para encontrar la solución del problema de optimización dentro del controlador. La estructura básica de control MPC fue modificada para poder incluir los objetivos de control, y tener en cuenta a su vez tanto las restricciones físicas como operacionales que hacen que el reactor opere lejos de las regiones de inestabilidad o inhibición para los microorganismos. A continuación, se resumen los principales resultados.

Para ajustar los parámetros del modelo a los datos experimentales, se usaron diferentes metodologías como los algoritmos genéticos y multistart, sin embargo, usando la metodología step-ahead se logró una mejora sustancial en el desempeño del ajuste. Con el uso del nuevo algoritmo, la mejora en el ajuste fue del 78.7%, 60.5%, 38.6%, 25.5% y 7.7% para las variables  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $Z$ ,  $pH$  y  $CH_4$  respectivamente. Los términos adicionados al modelo en la dinámica de alcalinidad  $Z$ ,  $k_{Z,1}$  y  $k_{Z,2}$ , permitieron lograr un mejor ajuste de esta dinámica a los datos experimentales. La redefinición de la alcalinidad permitió mejorar la condición de operación de buffering capacity, que vigila la capacidad que tiene el reactor para tolerar mayores niveles de acidez ante la necesidad de producir una mayor cantidad de metano. El observador de estados asintótico, usado para reconstruir las variables de estado  $X_1$  y  $X_2$ , mostró un buen desempeño al demostrar que en un periodo de 60 días pudo converger a los valores correctos, que fueron medidos para hacer la comparación y validar el desempeño del algoritmo. Igualmente, se demostró que la convergencia del estimador de cinéticas de reacción fue igualmente de 60 días. Para los dos casos anteriores, fue evidente que una vez los estimadores se acercaban al valor nominal, la estimación de las variables de estado y las cinéticas de reacción tuvieron un error marginal. Finalmente,

se evaluó el desempeño de los controladores MPC con y sin restricciones de operación de buffering capacity. Para cuando se operó el sistema de control sin restricciones, fue posible mejorar la producción de metano cerca de un 25% respecto al caso base (datos obtenidos experimentalmente sin controlador), sin embargo, las restricciones de operación fueron violadas en algún momento, lo que comprometió la correcta operación del sistema. Por otro lado, cuando se adicionaron las restricciones de operación el rendimiento se redujo alrededor del 21% con respecto al caso base, sin embargo, fue posible garantizar la estabilidad de la operación durante todo el tiempo de simulación, lo que evitó escenarios de inhibición o reducción en el rendimiento.

## 6.2 Trabajo futuro

Al final de esta tesis se logró diseñar un sistema de monitorización y control de reactores de digestión anaerobia, que es independiente de la composición de la materia orgánica que se use, esto debido a que incluye un amplio espectro de posibilidades de sustratos y fenómenos químicos y biológicos. Sin embargo, es necesario que este sistema tenga una mayor autonomía y una mayor sensibilidad con lo que ocurra dentro de la reacción homogénea. Aunque la metodología propuesta demostró tener un muy buen desempeño y que su implementación tendría una alta probabilidad de éxito, la generalización que se realizó en algunas partes del modelo matemático, debido al desconocimiento fenomenológico de lo que ocurre en esos lugares, debe ser reemplazado por estrategias que permitan ver más allá para que el sistema gane capacidad de maniobra y tenga un mayor número de grados de libertad que hagan que el sistema trabaje mejor dentro de los límites operacionales. Se han identificado dos vías de investigación interesantes, en las que si se lleva a cabo una exploración, planteamiento de objetivos específicos y un desarrollo metodológico, será posible realizar aportaciones con nuevas contribuciones a la ciencia en el área de los bioprocesos y digestión anaerobia. A continuación se explica cada uno de ellas.

Primero. Una continuación del proyecto de investigación actual consiste en evaluar la estructura propuesta de monitorización y control en un ambiente de operación real. Se instalarían los mismos sensores, protocolos de medición y equipos que se usaron en la prueba piloto llevada a cabo en el proyecto de tesis. Se conectarían estas fuentes de generación de información a un ordenador usando una interfaz de comunicación. El primer paso consistiría en verificar qué tan cercano es el comportamiento del sistema de control en la realidad comparado con los resultados de simulación, se utilizarían perfiles a las entradas del modelo muy similares a las que se usaron para llevar a cabo el proceso de identificación paramétrica. Ahora, la estrategia continuaría en plantear mejoras en cada una de las etapas de la estructura (identificación paramétrica, estimadores de estado y de cinéticas de reacción y controladores MPC) que hicieran que el desempeño de las simulaciones y los resultados en un ambiente real de operaciones fuera lo más cercano posible. Si lo anterior se pudiera llevar a cabo, se tendría el primer sistema real semi-autónomo que operaría un reactor de digestión anaerobia a nivel

industrial. Lo que tendría que llevarse a cabo a continuación es plantear un nuevo experimento en el que se trabaje con un material orgánico distinto, en el que se experimenten variaciones significativas en la caracterización de sus componentes que ingresan en el efluente.

Segundo. Se podría plantear otra vía para el modelado y diseño de un sistema de control para estos reactores de digestión anaerobia. Para sistemas homogéneos de reacción con flujos continuos de entrada y salida en un reactor, se ha propuesto en la literatura una transformación lineal que realice una descomposición del número de moles de las especies consideradas (que para nuestro caso son las variables de estado que contiene el modelo AM2), en tres partes distintas. Una vez se haya logrado llevar a cabo esta transformación, el conjunto de estados resultante se interpretan físicamente como sigue. La primera parte son aquel conjunto de  $R$  reacciones independientes consideradas dentro de la mezcla homogénea (la evolución de las reacciones en un conjunto independiente). La segunda parte consiste en esos estados que evolucionan con el material que ingresa proveniente de los flujos de entrada (la influencia del influente). Finalmente, la tercera parte consiste en aquellos estados que permanecen constantes, de estos hacen parte los conjuntos de variables invariantes de la reacción y flujos de entrada (el comportamiento de la reacción y de los flujos invariantes) [75]. Aunque los controladores MPC que se han propuesto en la literatura utilizando esta descomposición se encuentran muy bien definidos, la implementación en tiempo real continúa siendo un reto muy complejo de realizar, debido a la alta carga computacional que tienen. Los procesos de digestión anaerobia se plantean utilizando leyes de conservación de masa y energía para poder tener modelos matemáticos precisos de las dinámicas consideradas. Plantear un sistema de control para el proceso de digestión anaerobia dentro del reactor, basado en esta descomposición matemática, plantea una serie de ventajas tales como la reducción en la complejidad del modelo, una identificación de los sistemas de reacción, análisis de sensibilidad paramétricos, y por supuesto, adicional a todo lo anterior, un sistema de control con mayores grados de libertad. El costo computacional de este tipo de estrategias se reduce sustancialmente debido a que esta representación matemática permite representar el sistema en una matriz diagonal de estados, lo que reduce significativamente la carga computacional al hacer más eficiente el almacenamiento de información del sistema [71].

## 6.3 Contribuciones

Las contribuciones que se presentan a continuación se desarrollaron durante el tiempo de investigación del trabajo de tesis doctoral, desde el año 2017 hasta la fecha actual.

### 6.3.1 Actividades científicas

- Calibración del modelo AM2 modificado con el reto de usar datos de un proceso experimental real, en el que se adicionaron dos términos

a la dinámica de alcalinidad para poder usar un más amplio espectro de materiales orgánicos dentro del reactor de digestión anaerobia.

- Creación de una estructura para reconstruir la información que no era posible medir directamente, las variables de estado  $X_1$  y  $X_2$ , con el uso de un observador asintótico. Sobre esta estructura, se propuso un estimador que permitió conocer las cinéticas de reacción de los procesos de acidogénesis y metanización dentro del reactor. Esto permitió mejorar el planteamiento de modelos anteriores debido a que esta información se consideraba estática.
- Se planteó un sistema de control predictivo basado en modelo MPC, con restricciones operacionales, que le permitieron trabajar continuamente sin llegar a situaciones de riesgo como reducciones irreversibles en la producción de biogás o reducciones en el rendimiento del proceso debido a inhibiciones por el aumento del nivel de acidez.

### 6.3.2 Documentación científica

- **Artículos publicados en revistas**

- Cortes Ocana L., Cortes S., Cortes L. *Optimal Control Scheme on Anaerobic Processes in Biodigesters*. Chemical Engineering Transactions. 65, 433-438. 2018.
- Luis G. Cortés, J. Barbancho, D.F. Larios, J.D. Marin-Batista, A.F. Mohedano, C. Portilla, M.A. de la Rubia. *Full-Scale Digesters: On Online Model Parameter Identification Strategy*. Energies 2022.
- Luis G. Cortés, J. Barbancho, D.F. Larios, J.D. Marin-Batista, A.F. Mohedano, C. Portilla, M.A. de la Rubia. *Full-scale digesters: Model Predictive Control with On-line Kinetic Parameter Identification Strategy*. Energies 2022.

- **Artículos publicados en conferencias**

- L.G. Cortés, J.D. Marín-Batista, M.A. de la Rubia, A.F. Mohedano, D.F. Larios, J. Barbancho. *An Assessment of On-line Model Identification Using Luenberger Observer for Anaerobic Digestion*. 3rd International Congress of Chemical Engineering. Santander, Spain. 2019.

- **Exposición de resultados en estancias de investigación**

- L.G. Cortés. *Modelamiento y diseño de sistemas de control para reactores anaerobios*. Grupo de investigación Bioprocesos, Departamento de Ingeniería Química. Universidad Autónoma de Madrid. 2018.

## Bibliografía

- [1] Renisha Karki, Wachiranon Chuenchart, K.C. Surendra, Shilva Shrestha, Lutgarde Raskin, Shihwu Sung, Andrew Hashimoto, and Samir Kumar Khanal. Anaerobic co-digestion: Current status and perspectives. *Bioresource Technology*, 330:125001, 2021.
- [2] Karen López Buriticá, Simeón Trujillo, Carlos Acosta-Medina, and H. Granada D. Dynamical analysis of a continuous stirred-tank reactor with the formation of biofilms for wastewater treatment. *Mathematical Problems in Engineering*, 2015, 06 2015.
- [3] Mpho Muloiwa, Stephen Nyende-Byakika, and Megersa Dinka. Comparison of unstructured kinetic bacterial growth models. *South African Journal of Chemical Engineering*, 33:141–150, 2020.
- [4] Europe anaerobic digestion market size by feedstock, by process, by geographic scope and forecast. *Verified Market Research*, Europe Anaerobic Digestion Market:36450, 2021.
- [5] Bernard O., Hadj-Sadok Z., Dochain D., Genovesi A., and Steyer J.P. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnol Bioeng*, 75(4):424–438, 2001.
- [6] Brandon Hunter and Marc A. Deshusses. Resources recovery from high-strength human waste anaerobic digestate using simple nitrification and denitrification filters. *Science of The Total Environment*, 712:135509, 2020.
- [7] Linji Xu, Feifei Dong, Jixiang Yang, Wenzong Liu, Lei Zhu, Qiang He, Xinjie Wang, Honggang Li, and Xinzhu Wang. Electricity generation and acid and alkaline recovery from pickled waters/wastewaters through anaerobic digestion, bipolar membrane electro dialysis and solid oxide fuel cell hybrid system. *Energy Conversion and Management*, 251:114973, 2022.
- [8] Haiquan Dong, Liangchen Yue, Jun Cheng, Rongxin Xia, and Junhu Zhou. Microbial electrochemical degradation of lipids for promoting methane production in anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 345:126467, 2022.
- [9] Tianxue Yanga, Yingjun Li, Jixi Gao, Caihong Huang, Bin Chen, Lieyu Zhang, Xiaowei Wang, Ying Zhao, Beidou Xi, and Xiang Li. Performance of dry anaerobic technology in the co-digestion of rural organic solid wastes in China. *Energy*, 93(2):2497–2502, 2015.

- 
- [10] Duc Nguyen, Venkataramana Gadhamshetty, Saoharit Nitayavardhana, and Samir Kumar Khanal. Automatic process control in anaerobic digestion technology: A critical review. *Bioresource Technology*, 193:513–522, 2015.
- [11] M.A. de la Rubia, M. Perez, L.I. Romero, and D. Sales. Effect of solids retention time (srt) on pilot scale anaerobic thermophilic sludge digestion. *Process Biochemistry*, 41(1):79–86, 2006.
- [12] C. Manjusha and B. Sajeena Beevi. Mathematical modeling and simulation of anaerobic digestion of solid waste. *Procedia Technology*, 24:654–660, 2016.
- [13] Felipe Valencia, José D. López, Alfredo Núñez, Christian Portilla, Luis G. Cortes, Jairo Espinosa, and Bart De Schutter. Congestion management in motorways and urban networks through a bar gaining-game-based coordination mechanism. *Springer*, pages 1–40, 2015.
- [14] Alejandro Marquez-Ruiz, Carlos Mendez-Blanco, Marcella Porru, and Leyla Özkan. State and parameter estimation based on extent transformations. *Computer Aided Chemical Engineering*, 44:583–588, 2018.
- [15] Kil Hoil, Dewei Li, Xi Yugeng, and Li Jiwei. Model predictive control with on-line model identification for anaerobic digestion processes. *Biochemical Engineering Journal*, 128:63–75, 2017.
- [16] Nur H.A. Bahar, Michaela Lo, Made Sanjaya, Josh Van Vianen, Peter Alexander, Amy Ickowitz, and Terry Sunderland. Corrigendum to “meeting the food security challenge for nine billion people in 2050: What impact on forests?” [global environ. change 62 (2020) 102056]. *Global Environmental Change*, 65:102195, 2020.
- [17] Bo Zeng, Xin Ma, and Meng Zhou. A new-structure grey verhulst model for china’s tight gas production forecasting. *Applied Soft Computing*, 96:106600, 2020.
- [18] Xianpu Zhu, Dominic Yellezuome, Ronghou Liu, Zengzhen Wang, and Xin Liu. Effects of co-digestion of food waste, corn straw and chicken manure in two-stage anaerobic digestion on trace element bioavailability and microbial community composition. *Bioresource Technology*, 346:126625, 2022.
- [19] Kimberley E. Miller, Esther Grossman, Ben J. Stuart, and Sarah C. Davis. Pilot-scale biogas production in a temperate climate using variable food waste. *Biomass and Bioenergy*, 138:105568, 2020.
- [20] Sergi Vinardell, Sergi Astals, Konrad Koch, Joan Mata-Alvarez, and Joan Dosta. Co-digestion of sewage sludge and food waste in a wastewater treatment plant based on mainstream anaerobic membrane bioreactor technology: A techno-economic evaluation. *Bioresource Technology*, 330:124978, 2021.

- 
- [21] Myriam Esteban Gutiérrez. Co-digestion anaerobia de lodo de edar con residuos orgánicos de diferente naturaleza: combinación de técnicas experimentales y herramientas matemáticas. *Tecnun Universidad de Navarra*, Tesis doctoral, 2014.
- [22] Callie W Babbitt, Roni A Neff, Brian E Roe, Sauleh Siddiqui, Celeste Chavis, and Thomas A Trabold. Transforming wasted food will require systemic and sustainable infrastructure innovations. *Current Opinion in Environmental Sustainability*, 54:101151, 2022.
- [23] Jaai Kim, Jinsu Kim, and Changsoo Lee. Anaerobic co-digestion of food waste, human feces, and toilet paper: Methane potential and synergistic effect. *Fuel*, 248:189–195, 2019.
- [24] Muna Al-Obadi, Hiba Ayad, Shaligram Pokharel, and Mohamed Arselene Ayari. Perspectives on food waste management: Prevention and social innovations. *Sustainable Production and Consumption*, 2022.
- [25] Thomas A. Trabold and Vineet Nair. Chapter 3 - conventional food waste management methods. In Thomas A. Trabold and Callie W. Babbitt, editors, *Sustainable Food Waste-To-energy Systems*, pages 29–45. Academic Press, 2018.
- [26] Elena Friedrich and Cristina Trois. Ghg emission factors developed for the collection, transport and landfilling of municipal waste in south african municipalities. *Waste Management*, 33(4):1013–1026, 2013.
- [27] Loïc De Weerd, Simon De Jaeger, Tine Compernelle, and Steven Van Passel. How an incineration tax changes waste management practices among firms. *Resources, Conservation and Recycling*, 180:106172, 2022.
- [28] Avinash Patil, Amol Kulkarni, and Balasaheb Patil. Waste to energy by incineration. *Journal of Computing Technologies*, 3:12–15, 06 2014.
- [29] Tawanda Kunatsa and Xiaohua Xia. A review on anaerobic digestion with focus on the role of biomass co-digestion, modelling and optimisation on biogas production and enhancement. *Bioresource Technology*, 344:126311, 2022.
- [30] Yu Li and Zhenhua Zhang. Recognize the benefit of continuous anaerobic co-digestion of cow manure and sheep manure from the perspective of metabolic pathways as revealed by metatranscriptomics. *Bioresource Technology Reports*, 17:100910, 2022.
- [31] Shuzhen Zou and Di Kang. Relationship between anaerobic digestion characteristics and biogas production under composting pretreatment. *Renewable Energy*, 125:485–494, 2018.
- [32] Mohammad Nabi, Hong Liang, Lang Cheng, Wenbo Yang, and Dawen Gao. A comprehensive review on the use of conductive materials to improve anaerobic digestion: Focusing on landfill leachate treatment. *Journal of Environmental Management*, 309:114540, 2022.

- [33] Jonathan W.C. Wong, Guneet Kaur, Sanjeet Mehariya, Obulisamy Parthiba Karthikeyan, and Guanghao Chen. Food waste treatment by anaerobic co-digestion with saline sludge and its implications for energy recovery in hong kong. *Bioresource Technology*, 268:824–828, 2018.
- [34] Front matter. In G. Bastin and D. Dochain, editors, *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*, Process Measurement and Control. Elsevier, Amsterdam, 1990.
- [35] Chandra R., Takeuchi H., and Hasegawa T. Hydrothermal pretreatment of rice straw biomass: A potential and promising method for enhanced methane production. *Appl. Energy*, 94:129 – 140, 2012.
- [36] A. Vijin Prabhu, A.R. Sivaram, N. Prabhu, and A. Sundaramahalingam. A study of enhancing the biogas production in anaerobic digestion. *Materials Today: Proceedings*, 45:7994–7999, 2021. 2nd International Conference on Materials, Manufacturing, and Machining for Industry 4.0.
- [37] X. Yuan, B. Wen, X Ma, W. Zhu, X. Wang, S. Chen, and Z Cui. Enhancing the anaerobic digestion of lignocellulose of municipal solid waste using a microbial pretreatment method. *Bioreour. Technol.*, 154:1 – 9, 2014.
- [38] Khadidja Chaib Draa, Ali Zemouche, Marouane Alma, Holger Voos, and Mohamed Darouach. Nonlinear observer-based control with application to an anaerobic digestion process. *European Journal of Control*, 45:74–84, 2019.
- [39] Senem Önen Cinar and Kerstin Kuchta. Evaluation of temperature changes in anaerobic digestion process. *Detritus*, In Press, 03 2020.
- [40] Damien Batstone, Jürg Keller, Bob Newell, and Mark Newland. Model development and full scale validation for anaerobic treatment of protein and fat based wastewater. *Water Science and Technology*, 36(6-7):423–431, 09 1997.
- [41] G. Kiely, G. Tayfur, C. Dolan, and K. Tanji. Physical and mathematical modelling of anaerobic digestion of organic wastes. *Water Research*, 31(3):534–540, 1997.
- [42] John F. Andrews. A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. *Biotechnology and Bioengineering*, 10(6):707–723, 1968.
- [43] F E Mosey. Mathematical Modelling of the Anaerobic Digestion Process: Regulatory Mechanisms for the Formation of Short-Chain Volatile Acids from Glucose. *Water Science and Technology*, 15(8-9):209–232, 08 1983.

- 
- [44] Graef S. and Andrews J. Mathematical modelling and control of anaerobic digestion. *Water resources*, 8:261–289, 1974.
- [45] Damien Batstone, J Keller, Irini Angelidaki, Sergey Kalyuzhnyi, S Pavlostathis, A Rozzi, W Sanders, H Siegrist, and Vasily Vavilin. Anaerobic digestion model no 1 (adm1). *Water science and technology : a journal of the International Association on Water Pollution Research*, 45:65–73, 02 2002.
- [46] Nicoletta Kythreotou, Georgios Florides, and Savvas A. Tassou. A review of simple to scientific models for anaerobic digestion. *Renewable Energy*, 71:701–714, 2014.
- [47] Jaques Monod. Sur une mutation spontanée affectant le pouvoir de synthèse de la méthionine chez une bactérie coliforme. In André Lwoff and Agnes Ullmann, editors, *Selected Papers in Molecular Biology by Jacques Monod*, pages 36–47. Academic Press, 1978.
- [48] Amrhein M., Bhatt N., Srinivasan, B., and Bonvin D. Extents of reaction and flow for homogeneous reaction systems with inlet and outlet streams. *AIChE Journal*, 56:2873–2886, 2010.
- [49] J.B.S. Haldane. Enzymes. *MIT Press*, page 184, 1965.
- [50] Audrey Chai, Yee Wong, Soon-An Ong, Lutpi Nabilah, Sung-Ting Sam, Wei-Chin Kee, and Hock-Hoo Ng. Haldane-andrews substrate inhibition kinetics for pilot scale thermophilic anaerobic degradation of sugarcane vinasse. *Bioresource Technology*, 336:125319, 05 2021.
- [51] Yongjiang Wang and Freddy Witarsa. Application of contours, tesser, and first-order kinetics for modeling and simulation of a composting decomposition process. *Bioresource Technology*, 220:384–393, 2016.
- [52] H. Topiwala and C. G. Sinclair. Temperature relationship in continuous culture. *Biotechnology and bioengineering*, 13:795–813, 1971.
- [53] Fuqing Xu, Yebo Li, and Zhi-Wu Wang. Mathematical modeling of solid-state anaerobic digestion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 51:49–66, 2015.
- [54] Diana Z. Sousa, Andreia F. Salvador, Juliana Ramos, Ana P. Guedes, S. Barbosa, Alfons J. M. Stams, M. Madalena Alves, and M. Alcina Pereira. Activity and viability of methanogens in anaerobic digestion of unsaturated and saturated long-chain fatty acids. *Applied and Environmental Microbiology*, 79(14), 2013.
- [55] Y. Dong, X. Yan, F. Lu, M. Guo, and Y. Zhuang. Development and optimization of an unstructured kinetic model for sodium gluconate fermentation process. *Computers, Materials & Continua*, 48(1):43–55, 2015.

- [56] Farah Ahmad, Ahmad Jameel, Mohd Kamarudin, and Maizirwan Mel. Study of growth kinetic and modeling of ethanol production by *saccharomyces cerevisiae*. *Afr J Biotechnol*, 10, 01 2011.
- [57] Jagannathan Krishnan, Anthony Kishore, Athreya Suresh, Akshay Krishna Murali, and Jaikumar Vasudevan. Biodegradation kinetics of azo dye mixture: Substrate inhibition modeling. *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*, pages 365–374, 05 2017.
- [58] Sudipta Dey and Somnath Mukherjee. Performance and kinetic evaluation of phenol biodegradation by mixed microbial culture in a batch reactor. *International Journal of Water Resources and Environmental Engineering*, 2:40–49, 04 2010.
- [59] Dimpal Mahanta, Munindra Borah, and Pallabi Saikia. A study on kinetic models for analysing the bacterial growth rate. *International Association of Scientific Innovation and Research (IASIR)*, Volume 1:pp. 68–72, 12 2014.
- [60] Kasturi Dutta, Veeranki Dasu, Biswanath Mahanty, and Ashish Prabhu. Substrate inhibition growth kinetics for cutinase producing *pseudomonas cepacia* using tomato-peel extracted cutin. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 29:437–445, 10 2015.
- [61] Mohamad Suffian Annuar, Shaliza Ibrahim, K Ramachandran, and Irene Kit-Ping Tan. A kinetic model for growth and biosynthesis of medium-chain-length poly-(3-hydroxyalkanoates) in *pseudomonas putida*. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 25:217–228, 05 2008.
- [62] Filomena Costa, Cristina Quintelas, and Teresa Tavares. An approach to the metabolic degradation of diethylketone (dek) by *streptococcus equisimilis*: Effect of dek on the growth, biodegradation kinetics and efficiency. *Ecological Engineering*, 70:183–188, 2014.
- [63] Fatemeh Ardestani and Roxana Kasebkar. Non-structured kinetic model of *aspergillus niger* growth and substrate uptake in a batch submerged culture. *British Biotechnology Journal*, 4:970–979, 01 2014.
- [64] Mohit Prakash Mohanty, Bharati Brahmacharimayum, and Pranab Kumar Ghosh. Effects of phenol on sulfate reduction by mixed microbial culture: kinetics and bio-kinetics analysis. *Water Science and Technology*, 77(4):1079–1088, 12 2017.
- [65] R. Moletta, D. Verrier, and G. Albagnac. Dynamic modelling of anaerobic digestion. *Water Research*, 20(4):427–434, 1986.
- [66] D.J. Costello, P.F. Greenfield, and P.L. Lee. Dynamic modelling of a single-stage high-rate anaerobic reactor—i. model derivation. *Water Research*, 25(7):847–858, 1991.

- 
- [67] S. Hassam, E. Ficara, A. Leva, and J. Harmand. A generic and systematic procedure to derive a simplified model from the anaerobic digestion model no. 1 (adm1). *Biochemical Engineering Journal*, 99:193–203, 2015.
- [68] Abdelouahab Zaatri and Ridha Kelaiaia. Analysis and simulation of am2 model for anaerobic digesters. *Banat s Journal of Biotechnology*, XI, 11 2020.
- [69] Sanchez J.M., S. Arijo, Morinigo M.A. Munoz M.A., and Borrego J.J. Microbial colonisation of different support materials used to enhance the methanogenic process. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 41:480–486, 1994.
- [70] J.A. Isaza-Hurtado, H.A. Botero-Castro, and H. Alvarez. Robust estimation for lpv systems in the presence of non-uniform measurements. *Automatica*, 115:108901, 2020.
- [71] Alejandro Marquez-Ruiz, Carlos Mendez-Blanco, and Leyla Ozcan. Constrained control and estimation of homogeneous reaction systems using extent-based linear parameter varying models. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2020.
- [72] Noortje Groot, Georges Zaccour, and Bart De Schutter. Hierarchical game theory for system-optimal control: Applications of reverse stackelberg games in regulating marketing channels and traffic routing. *IEEEControl Systems*, 37(2):129–152, 2017.
- [73] Srinivasan B., Amrhein M., and Bonvin D. American institute of chemical engineers. *AIChE Journal*, 44(8):1858–1867, 1998.
- [74] Jurre Hanema, Mircea Lazar, and Roland Tóth. Tube-based lpv constant output reference tracking mpc with error bound. *IFAC-PapersOnLine*, 50(1):8612–8617, 2017.
- [75] Michael Amrhein, Nirav Bhatt, Balasubrahmanyam Srinivasan, and Dominique Bonvin. Extents of reaction and flow for homogeneous reaction systems with inlet and outlet streams. *American Institute of Chemical Engineers*, 2010.