

**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA
DE BIOMASA.**

**DAVID ALEJANDRO ZORRO ESPINOSA
RODRIGO STEFFAN CARABALLO CASTRO**

**UNIVERSIDAD ECCI
INGENIERIA MECANICA
BOGOTÁ, D.C.
2020**

**SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAEROBIA
DE BIOMASA.**

**DAVID ALEJANDRO ZORRO ESPINOSA
RODRIGO STEFFAN CARABALLO CASTRO**

Proyecto de Investigación

**ALBERTH RENNE GONZALEZ CARANTON
Ingeniera Mecánica**

**VÍCTOR MANUEL FONTALVO MORALES
Ingeniería Mecánica**

**UNIVERSIDAD ECCI
FACULTAD DE INGENIERIA
INGENIERIA MECANICA
BOGOTÁ D.C.
2020**

NOTA DE ACEPTACIÓN

Firma del presidente del jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

Tabla de contenido

1.	ANÁLISIS NUMÉRICO DE LA CANTIDAD DE METANO CH ₄ PRODUCIDO A TRAVÉS DEL PROCESO DE BIODIGESTIÓN ANAEROBIA.....	5
2.	PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN.....	5
	2.1. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA.....	5
	2.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA.....	7
3.	OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN.....	7
	3.1. OBJETIVO GENERAL.....	7
	3.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	7
4.	JUSTIFICACIÓN Y DELIMITACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN.....	8
	4.1. JUSTIFICACIÓN.....	8
	4.2. DELIMITACIÓN.....	10
5.	MARCO DE REFERENCIA DE LA INVESTIGACIÓN.....	10
	5.1. MARCO TEÓRICO.....	10
	5.2. MARCO CONCEPTUAL.....	22
	5.3. MARCO LEGAL.....	25
	5.4. MARCO HISTORICO.....	26
6.	TIPO DE INVESTIGACIÓN.....	29
7.	DISEÑO METODOLÓGICO.....	30
8.	RESULTADOS.....	36
	8.1. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO DE BIODIGESTION ANAEROBIA EN LA SIMULACION.....	36
	8.2. DIAGRAMA DE FLUJO EN LA SIMULACION.....	39
	8.3. ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN DE BIOMASAS AGRÍCOLAS UTILIZADAS.....	41
	8.4. DATOS EXPERIMENTALES OBTENIDOS.....	42
	8.5. ANÁLISIS ANOVA PARA LA COMPOSICIÓN DEL BIOGÁS.....	44
	8.5.1 Análisis ANOVA para la composición de metano obtenida:.....	45
	8.5.2. Análisis ANOVA para la composición de dióxido de carbono (CO ₂) obtenida:.....	53
	8.5.3. Análisis ANOVA para el poder calorífico LHV:.....	62
	8.5.4. Análisis ANOVA para la Energía Libre de Gibbs de la corriente de salida:.....	66
	8.6. Matriz de correlación.....	76
9.	CONCLUSIONES.....	78
10.	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	79

1. ANÁLISIS NUMÉRICO DE LA CANTIDAD DE METANO CH₄ PRODUCIDO A TRAVÉS DEL PROCESO DE BIODIGESTIÓN ANAEROBIA

2. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

2.1. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

En la actualidad el mundo ha tenido un gran crecimiento respecto a la población con una cifra del 1,1% al año (United Nations, Department of Economic and Social Affairs, 2017), lo que ha llevado a mejorar los procesos de producción, para facilitar el cultivo de alimentos, crianza de animales y productos orgánicos.

Debido al crecimiento en los procesos productivos, empresas, sectores ganaderos, sectores agrícolas, ciudades y pueblos generan una gran cantidad de residuos sólidos. Estos residuos generan productos contaminantes, como lo son el metano CH₄ y dióxido de carbono CO₂, dos gases efecto invernadero, que contribuyen al calentamiento global si no son aprovechados adecuadamente. Estos gases son generados por el uso excesivo de combustibles fósiles. Adicionalmente, el poco uso de energías renovables y el mal reaprovechamiento de residuos generan este tipo de emisiones, que contribuyen al calentamiento global. Por otra parte, en algunas ciudades y zonas rurales se dificulta la recolección de residuos orgánicos por falta de planificación contaminando química y biológicamente el agua y el suelo al no ser tratados adecuadamente.

En términos de renovabilidad, las fuentes de Biomasa son focos de estudio para procesos que permitan su aprovechamiento integral, incluyendo la utilización de todos los productos y subproductos generados en los diferentes procesos de transformación. La Biomasa puede aprovecharse en procesos termocatalíticos y procesos biológicos, de acuerdo con varios autores (Kavacik & Topaloglu, 2010;

Ozturk, 2012). Para el caso particular de los procesos biológicos la manera más simple de aprovechar la biomasa residual de diferentes procesos, son los procesos de hidrólisis enzimática, donde las fracciones de biomasa se hidrolizan parcialmente y en ausencia de oxígeno para permitir reacciones químicas de descomposición que secuencialmente generan alcoholes, ácidos carboxílicos y ácidos grasos en las primeras etapas del proceso, para posteriormente producir CO_2 y CH_4 , los dos componentes mayoritarios del Biogás (Comino et al., 2012). El Biogás es un combustible para procesos de producción de energía y materia prima para la producción de gas de síntesis a partir de métodos de reformado catalítico de Biogás (Turpeinen et al., 2008). Al utilizar Biogás se promueve la reducción de gases poluentes (Hengeveld et al.; 2014), impulsando procesos verdes y sostenibles (Angelidaki et al., 2018).

Los procesos de hidrólisis de biomasa generan productos de valor agregado, como sólidos utilizados como insumos, químicos y precursores primarios de biocombustibles (Allegue & Hinge, 2012). Siendo además una solución inmediata en regiones no interconectadas a la red de energía nacional (UPME, n.d.).

El desconocimiento de cuantos beneficios se pueden obtener por medio del proceso de biodigestión, como la energía o los productos para el suelo, además de beneficios ambientales asociados a la mitigación de emisiones y beneficios sanitarios, no ha permitido la integración energética en sistemas de generación de biogás a partir de los residuos sólidos de diferente naturaleza, un ejemplo de esto es en la región norte de Colombia donde hay un bajo compromiso de las instituciones para difundir este tipo de tecnologías; también la poca capacitación y educación de los habitantes (Tobon Abello, 2018).

En términos de modelamiento de este tipo de procesos, muchas son las variables para considerar, incluyendo el análisis de las posibles reacciones químicas planteadas en la literatura y los aspectos termodinámicos del proceso en cada etapa de la digestión de la biomasa residual. Algunos modelos determinísticos realizados en simuladores comerciales, permiten predecir el comportamiento de la

descomposición de biomasa en fase acuosa, incluyendo la termodinámica del proceso y la cinética de reacción del proceso para la predicción de la composición del biogás formado y sus respectivos valores energéticos, los cuales fueron utilizados en esta tesis, variando la naturaleza de las biomosas estudiadas y las condiciones de flujo y temperatura de entrada del proceso, al no tener influencia ninguna la presión del sistema, por tratarse de un proceso en fase acuosa.

2.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Bajo la óptica de poder realizar una simulación utilizando el programa Aspen Plus, la pregunta de investigación pertinente con esta investigación será:

¿Cuáles son las variables más relevantes del reactor, en el proceso de digestión anaerobia simulado en Aspen Plus que permitan obtener las mayores concentraciones de metano y los mayores valores del poder calorífico del gas de salida?

3. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

3.1. OBJETIVO GENERAL

Analizar el comportamiento del proceso de digestión anaerobia, simulado en Aspen Plus para diferentes tipos de biomasa en función de las variables del proceso, como son la temperatura de entrada al proceso de digestión anaerobia, el tipo de biomasa y el flujo másico de biomasa a condiciones de presión constante del sistema.

3.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Realizar la simulación del proceso de Biodigestión, incluyendo la selección de los componentes de la reacción, las reacciones involucradas, el modelo

termodinámico seleccionado y el diagrama de proceso o Flowsheet en el simulador.

- Describir el proceso de digestión anaerobia, incluyendo las reacciones a ser consideradas en la simulación, así como el paso a paso para inserir dichas reacciones y las condiciones de cada corriente al proceso.
- Caracterizar las fracciones líquidas de biomasa que serán utilizadas en la simulación en Aspen Plus.
- Diseñar la matriz de experimentos para el proceso de simulación realizado en Aspen Plus, con el objetivo de realizar las diferentes corridas y realizar la colecta de datos de salida para la corriente gaseosa.
- Colectar y analizar los datos experimentales de la composición del Biogás de salida y poder calorífico neto inferior.
- Analizar estadísticamente los resultados experimentales obtenidos y determinar los efectos estadísticos de las fluctuaciones experimentales del proceso, realizando un análisis de la matriz de covariancia y de la matriz de correlación de los datos experimentales.

4. JUSTIFICACIÓN Y DELIMITACIÓN DE LA INVESTIGACIÓN

4.1. JUSTIFICACIÓN

La formulación de esta investigación es pertinente y actual debido a la necesidad de aprovechar los residuos orgánicos de manera integral, generando productos gaseosos y energía térmica contenida en el poder calorífico del gas. Las emisiones de los gases de efecto invernadero ha repercutido en el cambio climático global causando aumentos de temperatura global de la tierra, cambios climáticos impredecibles, enfermedades respiratorias agudas y de manera positiva mercados de carbono renovable. Los gases efecto invernadero se acumulan en la atmosfera y tienen la capacidad de absorber parte de la radiación infrarroja y reemitir radiación del mismo tipo en todas las direcciones hacia la superficie de la Tierra y a la misma atmósfera. Ante la evidencia que la temperatura terrestre va en incremento, se han

establecido acuerdos internacionales para reducir las emisiones que contienen gases efecto invernadero. Como consecuencias del aumento en la concentración de gases efecto invernadero se han presentado cambios regionales y globales en la humedad del suelo, incrementos en el nivel del mar y derretimiento de glaciares, así como la mayor frecuencia de catástrofes naturales como huracanes, inundaciones y sequías (Faverín et al., 2014).

Existen varias formas de tratar los residuos sólidos, como lo son el compostaje, que es un proceso de transformación de materia orgánica para convertirla en compostaje, la lombricultura, donde las lombrices ingieren estos residuos y los transforma en un excelente abono orgánico (Ampuero Seguel, 2018).

La biodigestión es un proceso de transformación biológica, en el cual a partir de materias orgánicas y ausencia de oxígeno se promueve un proceso de hidrólisis que preliminarmente forma ácidos grasos y ácidos carboxílicos para finalmente formar CH_4 (metano) y CO_2 (Dioxido de carbono) en proporciones equimolares o muy próximas con trazas de otros gases y formación de lodos utilizados como abonos (Ampuero Seguel, 2018).

La investigación se realizó con el fin de encontrar una estimación de metano entre diferentes tipos de biomasa para determinar cuál de estas genera más cantidad de biogás rico en metano, con alto poder calorífico, siendo así un referente para aplicar en la industria, en especial para grandes productores de biomasa residual, promoviendo el aprovechamiento integral de los residuos en algunas comunidades y sectores empresariales que se verían involucrados y permeados por dicha investigación. Con este propósito el software de simulación permite reducir costos de estudios de planta piloto, viabilizando la producción a nivel semiexperimental.

A partir de un diseño de experimentos, se realizaron las corridas para obtener la información de la corriente de biogás a la salida del reactor, en función de parámetros de operación del reactor y de la composición en fase líquida de la

biomasa residual.

El buen funcionamiento de los sistemas de biogás produce una gran cantidad de ventajas para sus usuarios, la sociedad y el medio ambiente en general como la reducción del volumen de residuos que van a quedar, no necesitan mucho espacio, pueden hacerse plantas de pequeña o gran escala, son reducidos los olores e impactos locales, se puede producir energía gracias al biogás, el lodo resultante puede ser usado como bioabono (Ampuero Seguel, 2018).

Los resultados de esta investigación permitirán utilizar simulaciones determinísticas para predecir la composición y los valores energéticos del Biogás generado en un proceso de Biodigestión, cuando se modifica principalmente la composición de la Biomasa utilizada.

4.2. DELIMITACIÓN

Esta investigación está solamente delimitada al proceso de simulación a partir de datos de entrada, sin centrarse en el diseño ni construcción de biodigestores.

5. MARCO DE REFERENCIA DE LA INVESTIGACIÓN

5.1. MARCO TEÓRICO

5.1.1. Antecedentes de la producción de biogás a partir de Biomasa mediante procesos de biodigestión

La tabla 1 muestra los trabajos más relevantes acerca de procesos de aprovechamiento de biomasa residual para generación de Biogás en función del proceso de Biodigestión y de la calidad del gas obtenido:

Tabla 1. Residuos y su producción de Biogás

Tipo de residuo	Proceso de Biodigestión	Producción acumulada de biogás	Referencia
Residuos agroindustriales de yuca	Biodigestión en fase acuosa utilizando urea	U ₁ :1844 cm ³ U ₂ :3030 ml U ₃ :1875ml U ₄ :965ml U ₅ :47ml	(Nkodi et al., 2016)
Residuos de carne de pollo	Biodigestión en fase acuosa con diferentes tratamientos	TRA:0,022m ³ TRB:0,197m ³ TRC:0,069m ³	(Andrei et al., 2016)
Estiércol de perro	Biodigestión en fase acuosa	200 L	(Okoroigwe, et al., 2014)
Residuos generados por BBC	Biodigestión con diferentes tratamientos con concentraciones de bagazo y levadura	T ₁ :580 ml T ₂ :850ml T ₃ :1400ml T ₄ :1850ml	(Capurro Navarro, 2018)
Vástago de sorgo	Biodigestión ajustando el C/N con urea y codigestion con estiércol de vaca	Urea C/N35:328ml/gVS C/N30:381ml/gVS C/N25:413ml/gVS C/N20:333ml/gVS Codigestion CD25:478ml/gVS CD28:456ml/gVS CD31:431ml/gVS CD34:405ml/gVS CD36:381ml/gVS Blank:327ml/gVS	(Zhang et al., 2016)
Residuos de café	Biodigestión en fase acuosa con pulpa y mucilago	M1:10051,5ml M2:15778,3ml M3:19459,3ml	(Juan pablo Rojas Sossa, 2015)
Estiércol de vaca y de aves de corral	Biodigestión en fase acuosa	Aves de corral:0,83m ³ Vaca:6,33m ³	(Recebli et al., 2015)

Pulpa de yuca y estiércol de cerdo	Codigestion en fase acuosa de pulpa de yuca y estiércol de cerdo	0:100:316ml/gVS	(Panichnumsin et al., 2010)
		20:80:350ml/gVS	
		40:60:426ml/gVS	
		50:50:478ml/gVS	
		60:40:514ml/gVS	
		80:20:463ml/gVS	
		100:0:208ml/gVS	

5.1.2. Procesos de digestión anaerobia

La digestión anaeróbica es un proceso biológico complejo en el cual microorganismos se alimentan de residuos biodegradables o sólidos volátiles y los transforman en metano (CH_4) (Pannucharoenwong et al., 2019). Utilizando el proceso de digestión anaeróbica es posible convertir gran cantidad de residuos, residuos vegetales, estiércoles, efluentes de la industria alimentaria y fermentativa, de la industria papelera y de algunas industrias químicas, en subproductos útiles. El producto principal en la digestión anaerobia es el biogás el cual es una mezcla gaseosa en promedio de metano (50% a 70%) y dióxido de carbono (30% a 50 %) con pequeñas fracciones de otros componentes (Vico & Artemio, 2017). En la digestión anaerobia más del 90% de la energía disponible por oxidación directa se transforma en metano, consumiéndose sólo un 10% de la energía en crecimiento de bacterias frente al 50% consumido en un sistema aeróbico (Varnero Moreno, 2011).

En este proceso de múltiples etapas actúan diversas comunidades microbianas. Junto a los macronutrientes carbono, nitrógeno, fósforo y azufre, los oligoelementos son cruciales para un proceso de biogás efectivo debido a la demanda microbiana de oligoelementos en el ambiente anaeróbico (Wintsche et al., 2016).

En los entornos naturales y aplicaciones de ingeniería, la digestión anaerobia comúnmente ocurre a través de cuatro etapas biológicas principales, a saber, hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis, que son catalizadas por diferentes poblaciones microbianas y enzimas (Carneiro et al., 2020).

Estas etapas se muestran en la Figura 1:

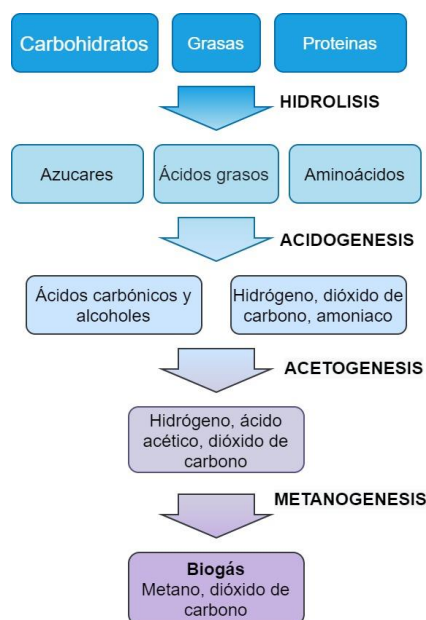


Figura 1. Proceso de transformación de biomasa en Biogás mediante metanogénesis (Adaptado de Clark energy)

La primera fase es la hidrólisis de partículas y moléculas complejas (proteínas, carbohidratos y lípidos) que son hidrolizadas por enzimas extracelulares producidas por los microorganismos acidogénicos. Como resultado se generan compuestos solubles más simples (aminoácidos, azúcares y ácidos grasos) que serán metabolizados por las bacterias acidogénicas dando lugar, principalmente, a ácidos grasos de cadena corta, alcoholes, hidrógeno, dióxido de carbono y otros productos intermedios. Los ácidos grasos de cadena corta son transformados en ácido acético, hidrógeno y dióxido de carbono, mediante la acción de los microorganismos acetogénicos. Por último, los microorganismos metanogénicos generan metano a partir de ácido acético, H_2 y CO_2 (Caruana & Olsen, 2012).

5.1.2.1. Hidrolisis de biomasa

Esta fase juega un papel importante para la transformación de la materia orgánica

por medio del consumo de organismos en la cual componentes grandes como proteínas, carbohidratos, y lípidos se convierten a una fase soluble (Siarni et al., 2020).

La etapa hidrolítica puede ser el proceso que limite la velocidad global del proceso sobre todo cuando se tratan residuos con alto contenido de sólidos. Además, la hidrólisis depende de la temperatura del proceso, del tiempo de retención hidráulico, de la composición bioquímica del sustrato (porcentaje de lignina, carbohidratos, proteínas y grasas), del tamaño de partículas, del nivel de pH, de la concentración de NH_4^+ y de la concentración de los productos de la hidrólisis (Varnero Moreno, 2011).

5.1.2.2. Acidogénesis

En la segunda fase de la digestión anaeróbica, las bacterias fermentativas usan hidrolizados como sustrato para transformarlos en ácido acético, ácido propiónico, ácido butírico y micromoléculas como pueden ser el etanol, H_2 y CO_2 . La categoría de sustratos y microorganismos que participan en la acidificación y la concentración de H^+ influirán en el tipo de productos durante la etapa de acidogénesis (Deng et al., 2020).

5.1.2.3. Acetogénesis

La acetogénesis es la fase de preparación para la metanogénesis. Durante esta fase los ácidos orgánicos con más de dos átomos de carbono y los alcoholes se convierten en acetato, CO_2 y H_2 por medio de las bacterias acetogénicas. Un tipo especial de microorganismos acetogénicos, son los llamados homoacetogénicos, este tipo de bacterias son capaces de crecer heterotróficamente en presencia de azúcares o compuestos monocarbonados (como mezcla H_2 / CO_2) produciendo

como único producto acetato. Al contrario que las bacterias acetogénicas, éstas no generan hidrógeno como resultado de su metabolismo, sino que lo consumen como sustrato. Según se ha estudiado, el resultado neto del metabolismo homoacetogénico permite mantener bajas presiones parciales del hidrógeno y, por tanto, permite la actividad de las bacterias acidogénicas y acetogénicas (Aquino Neto et al., 2018).

5.1.2.4. Metanogénesis

En esta etapa, un grupo de bacterias anaeróbicas estrictas (Archaea) actúa sobre los productos resultantes de las fases anteriores. Los microorganismos metanogénicos pueden ser considerados como los más importantes dentro de los microorganismos anaerobios, ya que son los responsables de la formación de metano y de la eliminación del medio de los productos de los grupos anteriores, siendo, además, los que dan nombre al proceso general de biometanización (Varnero Moreno, 2011).

El proceso de producción de metano comúnmente puede desarrollarse bajo el sintrofismo de bacterias acetogénicas productoras de hidrógeno con otros microorganismos que utilizan hidrógeno. Otros microorganismos que utilizan hidrógeno, como las bacterias reductoras de sulfato, pueden competir con los metanógenos hidrogenotróficos por el hidrógeno, lo que puede disminuir los sustratos que pueden utilizar los metanógenos e influir en la producción de metano (Deng et al., 2020).

5.1.3. Factores determinantes en la producción de biogás

Es importante examinar algunos de los factores que gobiernan los procesos metanogénicos. Los microorganismos metanogénicos son muy susceptibles a los cambios en las condiciones ambientales. Muchos investigadores evalúan el desempeño de un sistema anaeróbico en función de la tasa de producción de

metano, porque la metanogénesis se considera un paso limitante del proceso. Debido a esto, la biotecnología anaeróbica requiere de un cuidadoso monitoreo de las condiciones ambientales. Algunas de estas condiciones ambientales son: temperatura (mesofílica o termofílica), tipo de materias primas, nutrientes y concentración de minerales traza, pH, toxicidad y condiciones redox óptimas. Estas condiciones se discuten a continuación:

5.1.3.1. Efecto de la temperatura del proceso

Uno de los factores más importantes que afecta drásticamente a la comunidades microbianas de la digestión anaeróbica es la temperatura, ya que influye en la actividad de poblaciones específicas en digestores que tratan diferentes tipos de residuos como melaza de remolacha, maíz, matadero, desechos municipales y estiércoles de cerdo (Lin et al., 2016). A altas temperaturas, las comunidades microbianas suelen estar dominadas por el filo Firmicutes y metanógenos hidrogenotróficos, mientras que Bacteroidetes y arqueas acetoclásticas son los grupos prevalentes para condiciones mesofílicas en reactores de tratamiento de lodos de depuradora o de codigestion entre desperdicios de comida y residuos de mataderos (Fernandez-Gonzalez et al., 2019).

5.1.3.2. Efecto del pH

El pH es otro parámetro importante que afecta el proceso de digestión anaeróbica, especialmente para la generación de AGV (ácidos grasos volátiles) en la fase de acidificación y la generación de CH_4 en la fase metanogénica. Los microorganismos metanogénicos son más sensibles a las variaciones de pH que los otros microorganismos de la comunidad microbiana anaeróbica. Los diferentes grupos bacterianos presentes en el proceso de digestión anaeróbica presentan unos niveles de actividad óptimos cercanos a la neutralidad. El óptimo es entre 5.5 y 6.5 para acidogénicos y entre 7.8 y 8.2 para metanogénicos. El pH óptimo para cultivos mixtos se sitúa en el rango entre 6.8 y 7.4, siendo el pH neutro el ideal, un bajo pH

puede inhibir la metanogénesis. Para mantener el pH ideal se puede agregar una base (Wang et al., 2018).

5.1.3.3. Efecto de los nutrientes salinos

Similar a otros procesos biológicos, para mantener una óptima actividad microbiana se requieren macronutrientes (nitrógeno y fósforo) y micronutrientes (minerales traza) en el proceso anaeróbico que ayuda la síntesis de nueva biomasa, sin embargo, una de las ventajas de los procesos de digestión anaeróbica, frente a los procesos aeróbicos, es su baja necesidad de nutrientes derivada de los bajos índices de producción de biomasa que presentan los microorganismos anaeróbicos. La cantidad de nitrógeno y fósforo requerido para la síntesis de biomasa puede calcularse asumiendo la fórmula empírica de una célula bacteriana anaeróbica como $C_5H_7O_2N$. La masa celular consiste de aproximadamente 12% de nitrógeno, lo cual significa que unos 12 g de nitrógeno se requieren por cada 100 g de biomasa anaeróbica producida (Varnero Moreno, 2011)

La demanda de fósforo corresponde a $1/7 - 1/5$ de la demanda de nitrógeno. Como regla general, se asume que un 10 % de la materia orgánica removida (DQO) durante el proceso anaeróbico se utiliza para la síntesis de biomasa. Esto puede utilizarse para determinar los requerimientos de nitrógeno y fósforo (Varnero Moreno, 2011).

Además del nitrógeno y el fósforo, se han identificado otros diversos nutrientes como esenciales para los microorganismos anaeróbicos. Los metales trazan tales como hierro, cobalto, molibdeno, selenio, calcio, magnesio, zinc, cobre, manganeso, tungsteno y boro a niveles de mg /L y la vitamina B12 en niveles de $\mu\text{g/L}$, se ha encontrado que mejoran la producción de metano. El Níquel es particularmente importante para los metanogénicos debido a que es un constituyente estructural del factor F430, el cual se encuentra únicamente en las bacterias metanogénicas. El

cobalto es importante debido a que también es un constituyente estructural de la vitamina B12, la cual cataliza la metanogénesis. El níquel, cobalto y otros minerales traza son esenciales para la degradación del metanol en un reactor bajo condiciones mesofílicas (Varnero Moreno, 2011).

5.1.4. Interacción entre sustrato, nutrientes y microorganismos

Dada la dificultad que presentan muchas aguas residuales por su composición química y por la presencia de diversos organismos en la mayor parte de los casos, es conveniente para el estudio racional del tratamiento considerar varios aspectos fundamentales como las interacciones microbianas. El objetivo principal del tratamiento de un agua residual es eliminar la materia orgánica presente y esto se logra facilitando el desarrollo, en condiciones naturales, de poblaciones microbianas y no de un microorganismo en específico (Sebastián Nogués et al., 2010).

Aunque existe la posibilidad de una siembra seleccionada para algunos casos de tratamientos, se debe considerar casi siempre que existen poblaciones microbianas heterogéneas. Estas son habitualmente una mezcla muy compleja de diferentes bacterias. La concentración de los componentes biológicos de estas poblaciones no es constante, ya que hay fluctuaciones en el tiempo que pueden ser muy drásticas. Aunque los procesos de tratamiento biológicos pueden tolerar ciertas variaciones existen límites a las mismas que, cuando son excedidas, producen fallos en el proceso (Nogués et al; 2010).

Las tecnologías de los digestores anaerobios difieren mucho con relación a su complejidad y diseño, y se ha demostrado que un solo diseño no es suficiente para diferentes tipos de efluentes. La velocidad de carga orgánica máxima de un proceso anaerobio está limitada por el tiempo de retención y por la actividad de los microorganismos involucrados en los mecanismos bioquímicos de degradación de la materia orgánica. Puesto que las bacterias formadoras de metano tienen una velocidad de crecimiento baja, la retención de los microorganismos es la clave de la

operación de los digestores anaerobios avanzados, que permiten operar con bajos tiempos de retención hidráulicos (TRH) y elevados tiempos de retención de sólidos (TRS) (Nogués et al; 2010).

Las técnicas actualmente utilizadas se basan en la propiedad de las bacterias de formar flóculos por unión con otras bacterias, o de adherirse sobre superficies sólidas (Nogués et al; 2010).

Por otra parte, en lo referente a la interrelación entre sustratos, se está desarrollando en gran medida la codigestión de residuos orgánicos, lo que permite el tratamiento de mezclas con otros residuos para optimizar la producción energética, facilitando además la gestión integral de residuos orgánicos en la zona de aplicación. La principal ventaja de la codigestión se basa en aprovechar la sinergia de las mezclas, y compensar carencias de cada uno de los sustratos por separado (Nogués et al; 2010).

Se han llevado a cabo varias experiencias de codigestion mezclando diferentes tipos de residuos, tanto a escala de laboratorio como a escala industrial, corroborando casi siempre las expectativas de un mayor potencial de biogás (Nogués et al; 2010).

5.1.5. Tipos de biodigestores

Todos los sistemas de digestión anaeróbica se adhieren a los mismos principios básicos, ya que utilizan como materia prima desperdicios de alimentos, estiércol animal o lodos de aguas residuales. Un biodigestor debería producir entre 200 a 400m³ de biogás con 50% a 70% de metano por tonelada seca de entrada. Aunque el proceso es el mismo, los diseños variarán de un digestor a otro (Nelson & Starcher, 2017).

Tabla 2. Tipos de biodigestores.

Tipo de biodigestor	Descripción	Ventajas y desventajas	Referencia
Plantas de globo	Este tipo de plantas tiene en la parte superior un digestor de bolsa en el cual se almacena el gas, la entrada y la salida se sitúan en la misma superficie de la bolsa.	<p data-bbox="1003 336 1117 361"><u>Ventajas</u></p> <p data-bbox="862 385 1247 549">Este tipo de digestor es muy económico y fácil de transportar por su bajo peso, en especial en aquellos sitios de difícil acceso.</p> <p data-bbox="862 572 1247 640">Al ser hermético se reducen las pérdidas.</p> <p data-bbox="984 663 1138 689"><u>Desventajas</u></p> <p data-bbox="854 712 1263 825">Bajo tiempo de vida útil, lo que hace necesario realizar una nueva instalación cada tres años.</p> <p data-bbox="854 849 1263 1059">También es muy vulnerable a sufrir roturas por condiciones climáticas adversas, por las acciones del hombre y los animales</p>	Corona (2017)

Plantas de domo fijo	Las plantas de domo fijo consisten en un recipiente fijo e inmóvil para gas, que se coloca en la parte superior del digestor. Cuando comienza la producción de gas, la mezcla se desplaza hacia el tanque de compensación. La presión del gas aumenta, el aumento de volumen del gas almacenado y con la diferencia de altura entre el nivel de la mezcla en el digestor y el nivel de la mezcla en el tanque de compensación.	<p style="text-align: center;"><u>Ventajas</u></p> <p>Costos de construcción relativamente bajos, larga vida útil.</p> <p>La construcción subterránea ahorra espacio y protege al digestor de cambios de temperatura; además su construcción genera fuentes de empleo.</p> <p style="text-align: center;"><u>Desventajas</u></p> <p>Los frecuentes problemas con la permeabilidad para gases del recipiente de ladrillos para el gas. Por lo tanto, las plantas de domo fijo sólo son recomendables cuando la construcción puede ser supervisada por técnicos experimentados de biogás. La presión del gas fluctúa dependiendo sustancialmente del volumen del gas almacenado.</p>	(Corona Zuñiga, 2007)
-----------------------------	--	--	-----------------------

Plantas de tambor flotante	Las plantas de tambor flotante consisten en un digestor subterráneo y un recipiente móvil para gas. El recipiente para gas flota, ya sea directamente sobre la mezcla de fermentación o en una chaqueta de agua. El gas se recolecta en el tambor de gas, que se levanta o baja, de acuerdo con el gas almacenado.	<u>Ventajas</u> Operación simple y fácil de entender: el volumen almacenado de gas es visible directamente. La presión del gas es constante, determinada por el peso del recipiente de gas. La construcción es relativamente fácil; los errores en la construcción no generan problemas mayores en la operación y la producción de gas.	(Corona Zuñiga, 2007)
		<u>Desventajas</u> Altos costos de los materiales para el tambor de acero, la susceptibilidad a la corrosión de las partes de acero, por lo que la vida útil de la planta es más corta; además existen costos fijos de mantenimiento para pintar el tambor.	

5.2. MARCO CONCEPTUAL

5.2.1. Biomasa

La biomasa es un material renovable natural complejo con una gran variabilidad química y puede referirse a materia orgánica viva o muerta. Su potencial de producción de energía varía en relación al proceso utilizado, que puede involucrar tecnologías elementales o altamente sofisticadas. Dado que este material se puede encontrar en todos los lugares del mundo, se debe promover su uso para la producción de energía y productos de energía secundaria (combustibles sólidos, líquidos y gaseosos) y aumentar las capacidades de recuperación de residuos agrícolas, forestales e industriales. Junto con otros recursos renovables, como la energía solar, eólica e hidroeléctrica, la biomasa es un importante recurso

energético sostenible del planeta en el futuro (Bonechi et al., 2017).

5.2.2. Biogás

El biogás es una mezcla de metano, un gas inflamable que también hace parte de la composición principal del gas natural con un contenido entre el 50-70%, dióxido de carbono con un contenido entre el 25-50% y otros compuestos que se genera por la degradación microbiana de materiales orgánicos de origen vegetal o animal en ausencia de aire, denominada digestión anaeróbica (DA) (Lamb, 2020).

El biogás industrial se obtiene por tres vías principales: el que se recupera directamente de los vertederos (rellenos sanitarios), proceso que se describe como la digestión anaeróbica pasiva; el proveniente de las aguas residuales urbanas y de efluentes industriales tratados en las estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) (fase de fermentación) y, por último, el producido con propósitos energéticos en plantas de digestión anaeróbica, tanto mesófilas (35 °C) como termófilas (55 °C), especialmente diseñadas para granjas, que incluyen digestores de residuos de procesamiento de la industria agroalimentaria, como cultivos intermedios y energéticos agrícolas, y de la basura doméstica (Arellano et al; 2017).

Además del biogás, existen otros tipos de gases considerados fuentes de energía renovable, como es el gas de síntesis. Este gas puede producirse a partir de procesos térmicos (por gasificación o pirólisis) de la biomasa, lo que da lugar a una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono junto con otros componentes, y puede tratarse posteriormente para modificar su composición y producir gas natural sustituto. El biogás y el gas de síntesis se utilizan principalmente como combustible, pero también pueden utilizarse como materia prima química (Arellano et al; 2017).

La digestión anaeróbica de materia orgánica en presencia de sulfato, sulfito o tiosulfato, usados como aceptores de electrones por las bacterias sulfatorreductoras (BSR), origina la competencia de las BSR con las bacterias acidogénicas (o

fermentativas) (BF), las acetogénicas (BA) y las arqueas metanogénicas por sustratos como el hidrógeno, el acetato, el propionato y otros ácidos grasos, lo que causa la presencia de H_2S en el biogás producido. Los porcentajes de H_2S y CH_4 del biogás estarán determinados por el resultado de esta competencia microbiana y de otros factores importantes, como el pH de operación (Arellano et al; 2017).

5.2.3. Media estadística

Es el promedio que se obtiene al sumar todos los datos obtenidos y dividiendo el total entre el número de datos de interés (Diz Cruz, 2016).

5.2.4. Varianza estadística

Se encarga de cuantificar la dispersión de los datos en respecto a las medias. Se obtiene con el promedio de los cuadrados de las desviaciones de cada dato con respecto a la media (Muñoz, 2004).

5.2.5. Desviación estándar

Es definida como la raíz cuadrada de la varianza de una variable aleatoria o de un grupo. Esta indica el nivel de dispersión en relación a la media (Muñoz, 2004)

5.2.6. Análisis ANOVA

Es una herramienta estadística para el estudio de uno o más elementos este se emplea al comparar varianzas de dos o más muestras (Triola, 2013).

5.2.7. Matriz de correlación

Es una matriz de coeficientes de correlacion entre varias variables. Los valores grandes en esta matriz indican una colinealidad importante entre las variables

involucradas. Sin embargo, la inexistencia de correlaciones extremas no implica falta de colinealidad (Ferré, 2009)

5.2.8. Grados de libertad

Los grados de libertad total son la cantidad de información en los datos. El análisis utiliza esa información para estimar los valores de los parámetros de población infinita. Los grados de libertad total están determinados por el número de observaciones en la muestra. El grado de libertad de un término muestra cuánta información utiliza el término. Si incrementa el tamaño de la muestra, obtendrá más información sobre la población, con lo cual aumentan los grados de libertad total. (Soporte Minntab, 2019)

5.3. MARCO LEGAL

Constitución Política de Colombia.

“Artículo 80. El Estado planificará el manejo y aprovechamiento de los recursos naturales, para garantizar su desarrollo sostenible, su conservación, restauración o sustitución. Además, deberá prevenir y controlar los factores de deterioro ambiental, imponer las sanciones legales y exigir la reparación de los daños causados. Así mismo, cooperará con otras naciones en la protección de los ecosistemas situados en las zonas fronterizas.”

LEY 1715 DE 2014 Por medio de la cual se regula la integración de las energías renovables no convencionales al Sistema Energético Nacional.

Artículo 1°. Objeto. La presente ley tiene por objeto promover el desarrollo y la utilización de las fuentes no convencionales de energía, principalmente aquellas de carácter renovable, en el sistema energético nacional, mediante su integración al mercado eléctrico, su participación en las zonas no interconectadas y en otros usos energéticos como medio necesario para el desarrollo económico sostenible, la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero y la seguridad del abastecimiento energético. Con los mismos propósitos se busca promover la gestión eficiente de la energía, que comprende tanto la eficiencia

energética como la respuesta de la demanda.

Artículo 2°. Finalidad de la ley. La finalidad de la presente ley es establecer el marco legal y los instrumentos para la promoción del aprovechamiento de las fuentes no convencionales de energía, principalmente aquellas de carácter renovable, lo mismo que para el fomento de la inversión, investigación y desarrollo de tecnologías limpias para producción de energía, la eficiencia energética y la respuesta de la demanda, en el marco de la política energética nacional. Igualmente, tiene por objeto establecer líneas de acción para el cumplimiento de compromisos asumidos por Colombia en materia de energías renovables, gestión eficiente de la energía y reducción de emisiones de gases de efecto invernadero, tales como aquellos adquiridos a través de la aprobación del estatuto de la Agencia Internacional de Energías Renovables (Irena) mediante la Ley 1665 de 2013.

5.4. MARCO HISTORICO

La digestión anaerobia que se da comúnmente en la naturaleza para la degradación de materia orgánica.

En 1682 Boyle planteó la posibilidad de obtener gas a partir de residuos animales y vegetales en descomposición. Mientras que Volta en el año 1776 mostro el interés científico por el proceso con fines energéticos, al identificar la relación entre la presencia de gas combustible con la descomposición de la materia orgánica en un ambiente en inexistencia de oxígeno, este gas había sido definido años antes como gas de los pantanos por, Shirley, en 1667 (Nogués et al; 2010)

En 1804, Dalton descubrió la presencia de metano en el gas. En 1808 Humphry Davy, produjo metano por medio de recipientes cerrados de laboratorio; este acontecimiento fue el punto de partida de la investigación sobre biogás. En 1875, Propoff descubrió que la formación de biogás se producía en condiciones anaerobias. Posteriormente, Pasteur realizo un estudio sobre la fermentación butírica donde descubrió los microorganismos anaerobios (tipo Clostridium). Asimismo, planteó la posibilidad de obtener metano a partir de estiércol. En 1884, propuso utilizar el metano producido en instalaciones de calefacción y alumbrado.

En 1890, Van Senus, estudió las actividades de varios microorganismos y sus relaciones existentes. En Gran Bretaña, en 1896, se utilizó biogás para el alumbrado público, obtenido a partir de lodos de depuradora introducidos en un digestor (Nogués et al; 2010).

Los primeros progresos en investigación y tecnología aparecen en el siglo XX en la India. Con los primeros digestores construidos para la producción de biogás con residuos orgánicos. En Europa, en 1906, Soehngen realizó una investigación sobre el proceso microbiológico de la digestión anaerobia, demostrando así la formación de metano a partir de la reacción entre el hidrógeno y el dióxido de carbono. En 1911, Gran Bretaña comienza a operar digestores en 1911 (Nogués et al; 2010).

Entre 1920 y 1930, se experimentó a escala de laboratorio y de planta piloto. En muchos casos ya se utilizaban los lodos de aguas residuales materia prima de los digestores. En 1927, Castellini estudió las relaciones simbióticas entre los diversos microorganismos que intervienen en el proceso de producción de metano (Nogués et al; 2010).

Durante 1927 y 1950 se ejecutaron varios trabajos experimentales sobre la producción de gas con residuos ganaderos y fue, en los años cuarenta, cuando se genera más interés por la digestión anaerobia en Europa cuando, a causa de la II Guerra Mundial, las fuentes de energía escaseaban (Nogués et al; 2010).

Por esta razón se desarrollaron una gran cantidad de instalaciones de digestión anaerobia en Alemania con objeto de potenciar nuevas fuentes de energía renovable. En 1951, se produjeron más 16 millones de metros cúbicos de biogás con un digestor a base de lodos de depuradora, que se emplearon con diferentes fines, en su mayoría como combustible para vehículos a motor. Sin embargo, esta tecnología fue disminuyendo debido al aumento creciente de los combustibles fósiles. Fue en 1973 a raíz de la crisis del petróleo cuando resurgió el interés por esta tecnología en Europa: se promovieron programas de investigación y desarrollo,

y se construyeron plantas industriales. Países industrializados como Canadá, Estados Unidos y parte de Europa solo se consideraba como un tratamiento para la reducción de grandes cantidades orgánicas de algunos residuos, sin beneficiarse de su uso como combustible y de los lodos como fertilizante, solo hasta la llegada de la crisis del petróleo (Nogués et al; 2010).

En China e India entre 1950 y 1970 la digestión anaerobia se desarrolló en gran medida. En ambos países usaban como materias primas los excrementos animales y humanos, algunos residuos agrícolas y desperdicios domésticos (Nogués et al; 2010)

Encabezando el campo de la investigación básica se encuentran India, China Estados Unidos, y diversos países europeos con investigadores dedicados a estudiar diferentes aspectos de la compleja fermentación anaerobia en sus fases ácida y metanogénica, con la intención de poder optimizar los procesos de producción de biogás. Estos países, también desarrollan investigaciones aplicadas con digestores y vertederos de gran tamaño, equipados con sistemas de control automático, almacenamiento de biogás y purificación, y producción de energía, lo que les permite obtener grandes eficiencias en los mismos (Sebastián Nogués et al., 2010).

Si bien inicialmente la digestión anaerobia había sido impulsada con fines energéticos luego se fue convirtiendo en un objetivo de depuración, en la actualidad vuelve a adquirir importancia como objeto energético del proceso. Con el aumento del precio de los combustibles fósiles el biogás se ha convertido una de las aplicaciones más atractivas. Estas, se han ampliado con el uso de la codigestión con cultivos energéticos. Esto ha motivado la producción europea, que en 2007 ha alcanzado los 5,9 Mtep, lo que representa un aumento del 20,5% en relación con el año 2006 (Sebastián Nogués et al., 2010).

Actualmente, Alemania se ha convertido en la actualidad en el país europeo con más producción de biogás ya que cuenta con más de 4.000 plantas de digestión anaerobia (Sebastián Nogués et al., 2010).

En Estados Unidos, exceptuando los digestores construidos en las plantas de aguas residuales urbanas, no hay una gran demanda de plantas de biogás comparable a la europea. Sin embargo, sí se está promoviendo el biogás de vertedero a través de la construcción de vertederos biorreactores (Sebastián Nogués et al., 2010).

Con respecto a los «países en vías de desarrollo», China tiene el mayor número de digestores. Estos son digestores de tecnología sencilla establecidos en zonas rurales; su capacidad media es de 10 m³ y suministran la energía que se emplea para fines domésticos y el efluente se utiliza en agricultura (Sebastián Nogués et al., 2010).

6. TIPO DE INVESTIGACIÓN

TIPO DE INVESTIGACIÓN	CARACTERÍSTICAS
<ul style="list-style-type: none">• Básica • Cuantitativa	<p>En la investigación básica se busca realizar una teoría o hipótesis en la cual se puede identificar la información más importante del estudio que se está realizando, se caracteriza porque parte de un marco teórico y permanece a él, su finalidad es formular nuevas teorías o modificar las existentes, y en incrementar el conocimiento, pero sin contrastar con algún aspecto práctico. Si se necesita de ella se pueden derivar otro tipo de investigaciones.</p> <p>La investigación cuantitativa se basa en el análisis de la realidad utilizando datos concretos como cifras, estos datos son estructurados y estadísticos, y brindan el</p>

	respaldo necesario para llegar a resultados.
--	--

La investigación abarcara dos tipos, el primer tipo la básica porque existe un marco teórico relacionado a la biodigestión y se busca incrementar el conocimiento respecto a la biomasa, se han hecho diversos estudios relacionados con este tema debido a que es uno de los mejores procesos para aprovechar los residuos, es un conocimiento vital para llevar a cabo la investigación y el segundo tipo la cuantitativa porque se recolectaran unos datos de distintas biomasa que intervienen en el proceso de creación de biogás y que servirán para ejecutar la simulación que nos ayudara a alcanzar el objetivo de la investigación.

7. DISEÑO METODOLÓGICO

El paquete Aspen Plus en versión *DEMO*, fue el utilizado para la simulación, ya que este software posee una mayor flexibilidad en relación con la inserción de algunos componentes o fracciones de biomasa, relacionado con proteínas, ácidos carboxílicos y compuestos oxigenados que deben simularse con un paquete termodinámico robusto. En este sentido los modelos de actividad presentados por el paquete pueden reproducir con alto grado de confianza, el comportamiento no ideal para mezclas líquidas en estos procesos.

La investigación busca simular un proceso teórico o simulación utilizando no máximo 3 biomasa diferentes, debido a los antecedentes y los reportes en la literatura, el desarrollo y colecta de los datos será determinado mediante el diseño de experimentos a continuación: Se tendrá como base una tabla inicial de referencia para informar la cantidad de experimentos que se pretende realizar, de acuerdo con

la Tabla 3.

Tabla 3. Diseño de experimentos propuesto para la investigación

Variabes del diseño experimental	Niveles del diseño experimental	Variable normalizada	Número de experimentos
Tipo de biomasa	Residuos de Cerdo	-1	48
	Residuos de Vaca	0	
	Bagazo de caña	1	
Flujo de Biomasa	Flujo 1 : 46,61 L/día	-1	
	Flujo 2 : 92,74 L/día	0	
	Flujo 3 : 138,87 L/día	1	
	Flujo 4 : 185	2	
Temperatura de entrada al proceso	T-1 : 25 cº	-1	
	T-2 : 40 cº	0	
	T-3 : 55 cº	1	
	T-4 : 70 cº	2	

El diseño experimental propuesto es un diseño factorial con tres variables y tres o cuatro niveles dependiendo de la variable.

La matriz de experimentos, definida para la realización de las corridas, está dada por la Tabla 4:

Tabla 4. Matriz de experimentos para la propuesta de investigación

Corrida	Tipo de Biomasa	Flujo de Biomasa	Temperatura de entrada	
1	-1	-1	-1	-1
2	-1	0	0	-1
3	-1	1	1	-1
4	-1	2	2	-1
5	-1	-1	-1	0
6	-1	-1	-1	1
7	-1	-1	-1	2
8	-1	0	0	0
9	-1	0	0	1
10	-1	0	0	2
11	-1	1	1	0
12	-1	1	1	1
13	-1	1	1	2
14	-1	2	2	0
15	-1	2	2	1
16	-1	2	2	2
17	0	-1	-1	-1
18	0	0	0	-1
19	0	1	1	-1
20	0	2	2	-1
21	0	-1	-1	0
22	0	-1	-1	1
23	0	-1	-1	2
24	0	0	0	0
25	0	0	0	1
26	0	0	0	2
27	0	1	1	0
28	0	1	1	1

29	0	1	2
30	0	2	0
31	0	2	1
32	0	2	2
33	1	-1	-1
34	1	0	-1
35	1	1	-1
36	1	2	-1
37	1	-1	0
38	1	-1	1
39	1	-1	2
40	1	0	0
41	1	0	1
42	1	0	2
43	1	1	0
44	1	1	1
45	1	1	2
46	1	2	0
47	1	2	1
48	1	2	2

Para analizar la variabilidad los experimentos estos fueron realizados en orden aleatorio, asumiendo que las fluctuaciones experimentales siguen la distribución normal de probabilidad. En la matriz experimental, se generaron los datos de salida para analizar los efectos combinados de las variables o factores sobre las respuestas del proceso.

El modelo termodinámico que se utilizó fue un modelo de actividad, en fase líquida. Los modelos de actividad permiten definir todas las interacciones termodinámicas del sistema, utilizando conceptos de composición local y de minimización de energía libre de Gibbs, describiendo adecuadamente los sistemas en equilibrio líquido-líquido y vapor-líquido para compuestos biomásicos incluyendo proteasas, ácidos

carboxílicos y compuestos oxigenados, el modelo también es aplicable a moléculas más grandes como soluciones o mezclas de monómeros y polímeros. Aspen Plus contiene en sus bases de datos todos los parámetros necesarios para la simulación, teniendo en cuenta los componentes que intervienen en el proceso estudiado. El modelo termodinámico de UNIQUAQ puede describirse por la ecuación (2):

$$\ln g_i = \ln \frac{a_i}{x_i} + 0.5Z \ln \frac{a_i}{x_i} + L_i - \frac{a_i}{x_i} \sum_{j=1}^n \frac{a_j}{x_j} L_j x_j + q_i \left[1 - \ln \frac{a_i}{x_i} - \sum_{j=1}^n \frac{a_j}{x_j} \frac{q_j t_{ji}}{a_i} \frac{q_k t_{ki}}{a_i} \right] \quad (2)$$

donde los términos L_i , Θ_i , τ_i , ϕ_i están representados por las Ecuaciones (3-6) :

$$L_i = 0.5Z(r_i - q_i) - r_i + 1 \quad (3)$$

$$t_{ij} = \exp \left[\frac{a_{ij} + b_{ij} T}{RT} \right] \quad (4)$$

$$f_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (5)$$

$$q_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (6)$$

donde γ_i es el coeficiente de actividad del componente i ; x_i es la fracción molar del componente i ; T es la temperatura (K); n es el número total de componentes; Z es un parámetro dado por el número de coordinación de la molécula i ; a_{ij} es un parámetro de interacción molecular entre los componentes i y j (cal/gmol), no dependiente de la temperatura; b_{ij} es el segundo parámetro de interacción molecular entre los componentes i y j (cal/gmol), dependiente de la temperatura; q_i es un parámetro de área superficial de Van der Waals; A_{wi} es el área de Van der Waals; r_i es el parámetro del volumen de Van der Waals; y V_w es el volumen de Van der Waals. Sobre la base de un conjunto de variables de entrada, como la temperatura de reacción, la presión y las relaciones molares de los reactivos, se

determinan las fracciones molares en el equilibrio de los reactivos y productos, utilizando los conceptos de equilibrio de fase y equilibrio químico de manera unificada.

A partir de un paquete de reacciones químicas insertadas por el usuario, Aspen Plus calcula las fracciones molares en equilibrio. El algoritmo utilizado para determinar las composiciones en equilibrio en función de la temperatura, la presión y la composición de la entrada se determina mediante las rutinas de cálculo matemático del software basadas en algoritmos de minimización de energía libre de Gibbs. En general, el cálculo sigue los siguientes pasos: i) inserción de la lista de componentes de la base de datos del programa informático; ii) elección del modelo termodinámico que se utilizará; iii) inclusión de reacciones químicas para la minimización de la energía libre de Gibbs; iv) definición del reactor de equilibrio. Después de esto, se desarrolla un estudio de caso, seleccionando las variables independientes: presión, temperatura y relación molar de etileno/ácido acético en la alimentación.

Fue utilizada una simulación base, utilizando un modelo de simulación que incluye un set de reacciones químicas consideradas en los procesos de transformación de biomasa en biogás, considerando fragmentos parciales de compuestos metilo, acetato y oligoelementos presentes en la Biomasa, basado en el trabajo desarrollado por Rajendran et al; (2014), el cual contiene diferentes tipos de reacciones, indicando que los compuestos más importantes para el proceso de hidrólisis son los carbohidratos, que están representados mayormente en (celulosa, hemicelulosa, glucosa, entre otros), proteínas (soluble e insoluble) y grasas (trioleína, tripalmito, entre otras). Los datos numéricos agregados a Aspen plus se encuentran en el anexo 1, anexo 2 y anexo 3

El modelo de (Rajendran et al., 2014), fue desarrollado para reactores que operan en condiciones termófilas (55 °C) por tal motivo no evaluaremos la temperatura del reactor como variable, solamente la temperatura de entrada de la Biomasa, que teóricamente tendría un efecto sobre el calor sensible del reactor y el balance de

energía del reactor.

A partir de las corridas, se obtendrán datos de composición para los componentes principales del Biogás (CH₄ y CO₂), así como los parámetros energéticos del biogas obtenido que incluye la entalpia de la corriente de gas, la entropía del gas, la energía libre de gibbs y los valores caloríficos del gas Neto superior (HHV, por sus siglas “Higher Heating value”) y el poder calorífico neto inferior (“Lower Heating Value”)

8. RESULTADOS

8.1. DESCRIPCION DEL PROCESO DE BIODIGESTION ANAEROBIA EN LA SIMULACION

Los componentes requeridos para la simulación fueron obtenidos de las ecuaciones agregadas a Aspen Plus en la sección de propiedades-componentes-especificaciones.

Tabla 5. Componentes de la simulación

Componente ID en Aspen Plus	Nombre del componente	Formula química
WATER	AGUA	H ₂ O
GLYCEROL	GLICEROL	C ₃ H ₈ O ₃
OLEIC-AC	ACIDO OLEICO	C ₁₈ H ₃₄ O ₂
DEXTROSE	GLUCOSA	C ₆ H ₁₂ O ₆
ACETI-AC	ACIDO ACETICO	C ₂ H ₄ O ₂ -1
PROPI-01	ACIDO PROPANOICO	C ₃ H ₆ O ₂ -1
ISOBU-01	ACIDO ISOBUTIRICO	C ₄ H ₈ O ₂ -4
ISOVA-01	ACIDO ISOVALERICO	C ₅ H ₁₀ O ₂ -D3
H+	H+	H+
OH-	OH-	OH-
NH3	AMONIACO	H ₃ N
NH4+	NH4+	NH ₄ +
CO2	DIOXIDO DE CARBONO	CO ₂

C5H7NO2	CIANOACETATO DE ETILO	C5H7NO2
ARGININE	ARGININA	C6H14N4O2-N2
HISTIDIN	HISTIDINA-E-2	C6H8N3O2-E
LYSINE	LISINA	C6H14N2O2
TYROSINE	TIROSINA	C9H11NO3
TRYPTOPH	TRIPTOFANO	C11H12N2O2
PHENYLAL	FENILALANINA	C9H11NO2
CYSTEINE	CISTEINA-E-2	C3H6NO2S-E
METHIONI	METIONINA	C5H11NO2S
THREONIN	TREONINA	C4H9NO3
SERINE	SERINA	C3H7NO3
LEUCINE	LEUCINA	C6H13NO2
ISOLEUCI	ISOLEUCINA	C6H13NO2-I
VALINE	VALINA	C5H11NO2
GLUTAMIC	ACIDO GLUTAMICO	C5H9NO4
ASPARTIC	ACIDO ASPARTICO	C4H7NO4
GLYCINE	GLICINA	C2H5NO2-D1
ALANINE	ALANINA	C3H7NO2
PROLINE	PROLINA	C5H9NO2-N8
HYDROGEN	HIDROGENO	H2
METHANE	METANO	CH4
INDOLE	INDOLE	C8H7N
FROMAMID	FORMAMIDA	CH3NO
H2S	ACIDO SULFHIDRICO	H2S
CH4S	METANOTIOL	CH4S
BENZENE	BENCENO	C6H6
PHENOL	FENOL	C6H6O
H2CO3	ACIDO CARBONICO	H2CO3
HCO3-	HCO3-	HCO3-
CO3-2	CO3--	CO3-2
HS-	HS-	HS-
CELLULOS	CELULOSA	CELLULOSE
HEMECELL	ACIDO GLUTARICO	C5H8O4
GLUCOSE	GLUCOSA	C6H12O6
TRIOLEIN	TRIOLEINA	C57H104O6
TRIPALM	TRIPALMITINA	C51H98O6
PALM	ALCOHOL CETILICO	C16H34O

SN-1--01	SN-1-PALMITO-2-OLEIN	C ₃₇ H ₇₀ O ₅ -1
SN-1--02	SN-1-PALMITO-2-LINOLEIN	C ₃₇ H ₆₈ O ₅ -1
XYLOSE	XILOSA	C ₅ H ₁₀ O ₅
FURFURAL	FURFURAL	C ₅ H ₄ O ₂
LINOLEIC	ACIDO LINOLEICO	C ₁₈ H ₃₂ O ₂
STARCH	CELULOSA	CELLULOSE
ETHANOL	ETANOL	C ₂ H ₆ O-2
PROTEIN	PROTEINA	C ₁₃ H ₂₅ O ₇ N ₃ S
KERATIN	KERATINA	C4.39H8NO2.1
ACETATE	CH ₃ COO-	CH ₃ COO-
INERT	INERTE	INERT

El modelo divide las reacciones de la digestión en 2 grupos, las reacciones de hidrólisis que operan basadas en la extensión de la reacción, lo cual es la conversión fraccional de los reactivos en productos en una escala de 0,0 a 1,0. La hidrólisis es uno de los pasos limitantes en la velocidad de la digestión anaerobia por lo que se añadió aparte, con las reacciones separadas un efecto de pretratamiento se puede estudiar mejor, para estas reacciones usaron un reactor estequiométrico que viene en la base de Aspen Plus. Las reacciones correspondientes a la fase de hidrólisis se añadieron al anexo 4. El otro grupo de reacciones hace parte de las otras fases (acidogenesis, acetanogenesis y metanogénesis) y son reacciones cinéticas, para las cuales usaron un reactor de tanque continuamente agitado (CSTR), con diferentes factores pre-exponenciales dependiendo de la reacción que se obtuvieron de otros estudios (Angelidaki et al., 1999; Batstone et al., 2002) y son necesarios debido a que Aspen plus usa la ecuación 7 llamada ecuación de Arrhenius para determinar la velocidad de las reacciones.

$$k = AT^n e^{-E_a/(RT)} \quad (7)$$

Las reacciones cinéticas se añadieron al anexo 5.

8.2. DIAGRAMA DE FLUJO EN LA SIMULACION

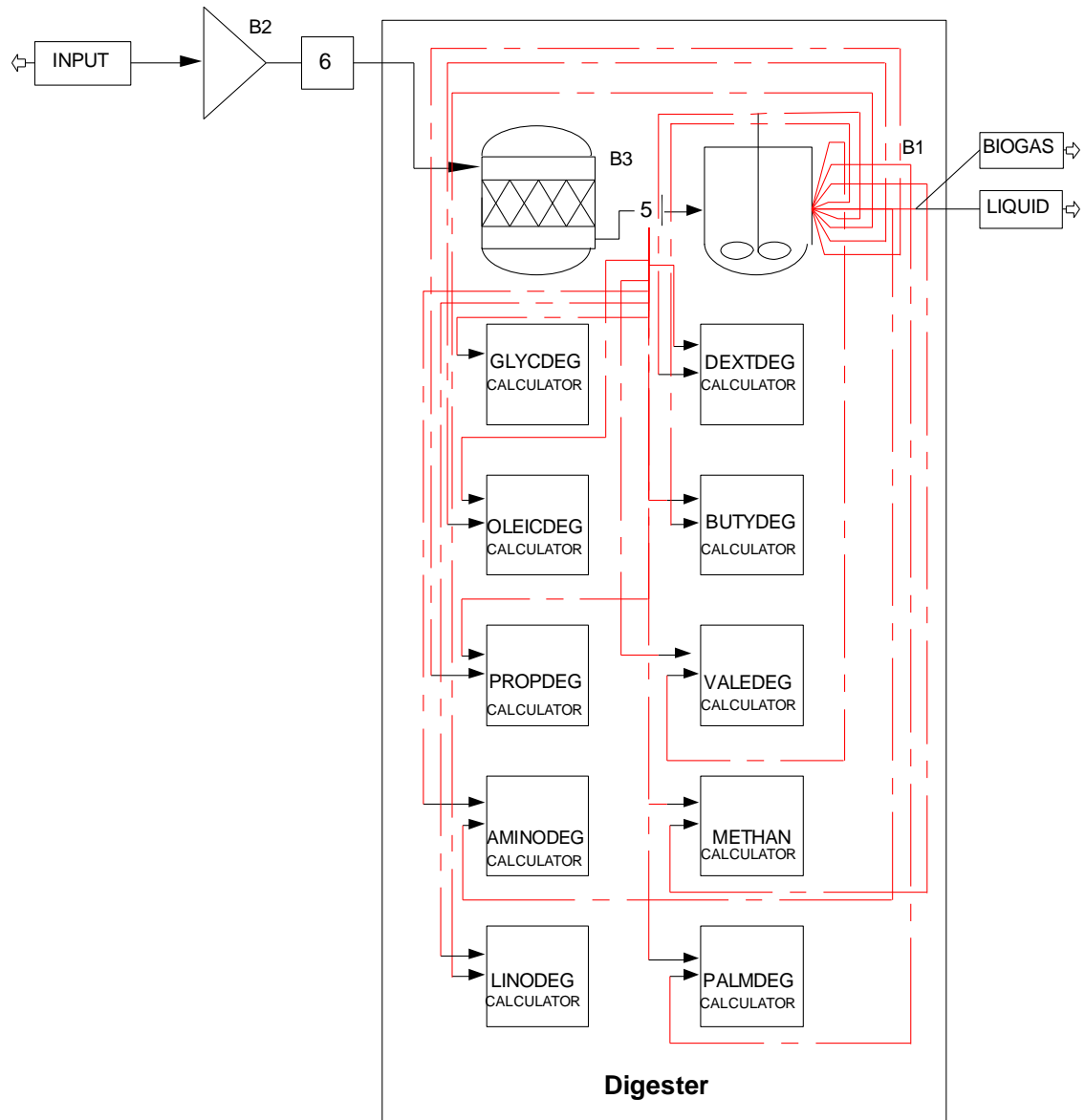

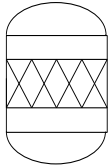
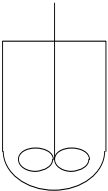
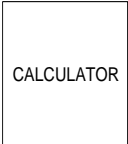

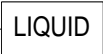


Figura 2. Diagrama de la simulación de biodigestión

La tabla 6 muestra las convenciones que hacen parte del diagrama de flujo de la figura 2

Tabla 6. Convenciones del diagrama de flujo

Símbolo	Descripción
	Input: Es la entrada donde se ingresan los parámetros más importantes como la composición del fluido, la temperatura de entrada y su flujo.
	B3 (Reactor estequiométrico): En donde las reacciones cinéticas no son relevantes o son desconocidas, pero se conoce la estequiometria y el efecto de la reacción, en este caso se usa en la etapa de hidrólisis.
	B1 (Reactor de tanque agitado continuo): Es el reactor basado en cinética donde se da la correlación de datos cinéticos, se usa para las otras fases de la biodigestión.
	Calculator Blocks: Se utilizaron diez bloques calculadores para resolver las reacciones cinéticas para el glicerol, ácido valérico, ácido propiónico, ácido linoleico, aminoácidos, azúcares, ácido oleico, metanogénesis e hidrógeno.
	Biogás: Es el flujo de salida donde se muestra la producción de gas y otras propiedades.
	Liquid: Es el flujo de salida donde se muestra la producción de líquido o abono y otras propiedades.

8.3. ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN DE BIOMASAS AGRÍCOLAS UTILIZADAS

Los datos de caracterización de la Biomasa que se pueden ver en la Tabla 7 fueron extraídos de varios trabajos, para los datos como Carbohidratos, Proteínas, Grasas y Cenizas se tomó de referencia a Budiyo et al; (2011) para el estiércol de Vaca, Fujita et al; (1980) para el estiércol de cerdo, y Vazquez et al; (1999) para el bagazo de caña, para los datos del análisis elemental se tomó de referencia a Young y Pian (2003) para el estiércol de vaca, Cantrell y Martin (2012) y Turn et al; (2006) para el bagazo de caña. Los datos del poder calorífico de las biomásas fueron calculados empíricamente gracias a las ecuaciones reportadas por Basu (2010) mediante las ecuaciones 8 y 9

$$HHV = 349,1[\%C] + 1178[\%H] + 100,5[\%S] - 103,4[\%O] - 15,1[\%N] - 21,1[\%Cenizas] \quad (8)$$

Los porcentajes de los elementos en esta ecuación son en base seca

$$LHV = HHV - h_g \left[\frac{9 * [\%H]}{100} \right] + \left[\frac{\%M}{100} \right] \quad (9)$$

Los porcentajes en esta ecuación son en el total de la biomasa

HHV = Poder calorífico neto superior [kJ/Kg]

LHV = Poder calorífico neto inferior [kJ/Kg]

h_g = Calor latente de vaporización del vapor = 2260 KJ/Kg

C = % Carbono

H = % Hidrogeno

S = % Azufre

O = % Oxigeno

N = % Nitrógeno

M = % Humedad

La Tabla 7 muestra la composición reportada por los autores en base seca y el poder calorífico calculado empíricamente con las ecuaciones (8) y (9).

Tabla 7. Composición de las biomásas

Componente	Estiércol de vaca	Estiércol de cerdo	Bagazo de caña
Carbohidratos	70,00%	44,06%	65,80%
Proteínas	8,00%	23%	1,80%
Grasas	2,00%	4,90%	0,60%
Cenizas	20%	28,04%	31,80%
Análisis elemental (%)			
C	44,65%	47,42%	45,45%
H	5,85%	6,01%	5,26%
N	2,05%	4,11%	0,23%
O	38,18%	20,06%	36,65%
S	0,31%	0,94%	0,05%
Poder calorífico teórico (kJ/kg)			
HHV (KJ/Kg)	18343,702	21097,284	18015,177
LHV (KJ/Kg)	16403,718	19346,688	16397,921

8.4. DATOS EXPERIMENTALES OBTENIDOS

La Tabla 8 muestra los datos experimentales obtenidos para los valores de la composición del Biogás y sus respectivos poderes caloríficos, en la corriente de salida del Biorreactor, del diagrama de flujo de la Figura 2 donde BT indica el Tipo de biomasa, BF indica Flujo de biomasa y T la Temperatura de entrada.

Tabla 8. Datos experimentales.

BT	BF	T	CO ₂	CH ₄	LHV J/kmol	ΔG J/kmol
-1	-1	-1	0,2578	0,5379	5,7336E+08	-1,6603E+08
-1	0	-1	0,2579	0,5378	5,7324E+08	-1,6605E+08
-1	1	-1	0,2579	0,5377	5,7320E+08	-1,6606E+08
-1	2	-1	0,2579	0,5377	5,7318E+08	-1,6606E+08
-1	-1	0	0,2578	0,5379	5,7338E+08	-1,6602E+08
-1	-1	1	0,2577	0,5382	5,7295E+08	-1,6600E+08
-1	-1	2	0,2577	0,5379	5,7353E+08	-1,6600E+08
-1	0	0	0,2579	0,5378	5,7322E+08	-1,6605E+08
-1	0	1	0,2578	0,5380	5,7277E+08	-1,6603E+08
-1	0	2	0,2579	0,5378	5,7327E+08	-1,6604E+08
-1	1	0	0,2579	0,5377	5,7321E+08	-1,6606E+08
-1	1	1	0,2578	0,5380	5,7276E+08	-1,6604E+08
-1	1	2	0,2579	0,5377	5,7322E+08	-1,6605E+08
-1	2	0	0,2579	0,5377	5,7319E+08	-1,6606E+08
-1	2	1	0,2578	0,5377	5,7274E+08	-1,6604E+08
-1	2	2	0,2579	0,5377	5,7320E+08	-1,6606E+08
0	-1	-1	0,3217	0,4990	4,7440E+08	-1,8983E+08
0	0	-1	0,3217	0,4990	4,7438E+08	-1,8984E+08
0	1	-1	0,3216	0,4991	4,7435E+08	-1,8980E+08
0	2	-1	0,3216	0,4992	4,7437E+08	-1,8980E+08
0	-1	0	0,3217	0,4990	4,7441E+08	-1,8983E+08
0	-1	1	0,3216	0,4992	4,7441E+08	-1,8980E+08
0	-1	2	0,3214	0,4994	4,7441E+08	-1,8975E+08
0	0	0	0,3217	0,4990	4,7438E+08	-1,8984E+08
0	0	1	0,3216	0,4991	4,7438E+08	-1,8981E+08
0	0	2	0,3215	0,4993	4,7438E+08	-1,8976E+08
0	1	0	0,3216	0,4991	4,7435E+08	-1,8980E+08
0	1	1	0,3215	0,4993	4,7437E+08	-1,8977E+08
0	1	2	0,3216	0,4992	4,7438E+08	-1,8979E+08
0	2	0	0,3216	0,4991	4,7435E+08	-1,8980E+08
0	2	1	0,3215	0,4993	4,7437E+08	-1,8977E+08
0	2	2	0,3216	0,4991	4,7437E+08	-1,8981E+08
1	-1	-1	0,3097	0,5252	4,5022E+08	-1,8633E+08
1	0	-1	0,3097	0,5252	4,5021E+08	-1,8633E+08
1	1	-1	0,3097	0,5252	4,5025E+08	-1,8633E+08
1	2	-1	0,3097	0,5252	4,5024E+08	-1,8633E+08
1	-1	0	0,3097	0,5250	4,5009E+08	-1,8631E+08
1	-1	1	0,3097	0,5253	4,5027E+08	-1,8632E+08
1	-1	2	0,3096	0,5253	4,5028E+08	-1,8632E+08

1	0	0	0,3097	0,5252	4,5021E+08	-1,8633E+08
1	0	1	0,3097	0,5253	4,5026E+08	-1,8633E+08
1	0	2	0,3097	0,5253	4,5027E+08	-1,8632E+08
1	1	0	0,3097	0,5252	4,5023E+08	-1,8633E+08
1	1	1	0,3097	0,5253	4,5026E+08	-1,8633E+08
1	1	2	0,3097	0,5253	4,5027E+08	-1,8632E+08
1	2	0	0,3097	0,5252	4,5025E+08	-1,8633E+08
1	2	1	0,3097	0,5252	4,5026E+08	-1,8633E+08
1	2	2	0,3097	0,5253	4,5027E+08	-1,8632E+08

8.5. ANÁLISIS ANOVA PARA LA COMPOSICIÓN DEL BIOGÁS

En esta sección se explicarán los resultados obtenidos del análisis ANOVA, en el cual fueron analizados los efectos de las variables de entrada sobre la variable obtenida, para la composición del Biogás y los valores energéticos obtenidos, los datos fueron analizados con Design Expert 11 y STATISTICA 9.0.

8.5.1 Análisis ANOVA para la composición de metano obtenida:

La Tabla 9 Muestra los parámetros obtenidos del resultado del análisis ANOVA de las fracciones de metano en la corriente de salida denominada “BIOGAS” en el diagrama de flujo.

Tabla 9. Resultados del análisis ANOVA para el metano.

Fuente	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado medio	Valor de Fisher	Significancia (Valor-p)	
Modelo	0,0124	7	0,0018	3,14E+08	<0,0001	significante
A- Tipo de Biomasa	0,0124	2	0,0062	1,10E+09	<0,0001	
C-	1,24E-04	1	1,24E-04	21,91	<0,0001	
Temperatura de entrada						
AB	1,10E-04	2	5,48E-05	9,67	0,0004	
BC	4,67E-05	1	4,67E-05	8,25	0,0065	
C³	8,71E-05	1	8,71E-05	15,37	0,0003	
Residual	2,27E-04	40	5,67E-06			
Cor Total	0,0124	47				

De acuerdo con el ANOVA factorial se pudo observar que hay diferencias significativas en la fracción de CH₄ en función de la significancia estadística para la variable Tipo de biomasa (F: 1.098E+06, p < 0.001). Las otras variables presentadas en la tabla como la Temperatura de entrada, Interacción Tipo de biomasa-Temperatura de entrada, Interacción Flujo de biomasa-Temperatura de entrada y Temperatura de entrada al cubo también fueron significativas, solo que, en menor medida a comparación del Tipo de biomasa, debido a que tuvieron un Valor p menor a 0,05.

El análisis de los residuales para la fracción de metano, mostro que el modelo predice adecuadamente el comportamiento, esto es esperado al tratarse de una

simulación sin fluctuaciones experimentales establecidas por un modelo determinístico, como lo muestra la Figura 3.

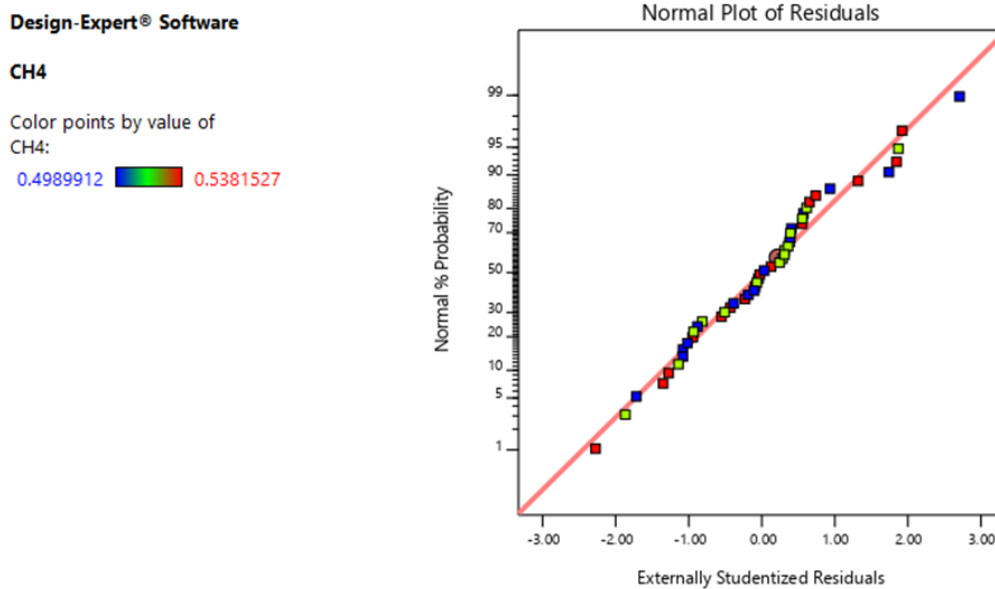


Figura 3. Probabilidad normal de los residuos para la fracción molar de metano.

Cualquier desviación uniforme de una línea recta sería una señal de conducta no normal; en este caso se ve que los residuos se ubican alrededor de la recta normal, lo cual ocurre al no tener fluctuaciones experimentales.

En el análisis de los valores residuales Vs los valores predichos para la simulación, se observó cierto grado de aleatoriedad, con puntos no uniformemente distribuidos, probablemente a que el efecto de aleatoriedad pesa más sobre el tipo de biomasa que sobre las otras variables, también se observó que no hay valores atípicos ya que no sobrepasan los límites como lo muestra la Figura 4.

Design-Expert® Software

CH4

Color points by value of

CH4:

0.4989912  0.5381527

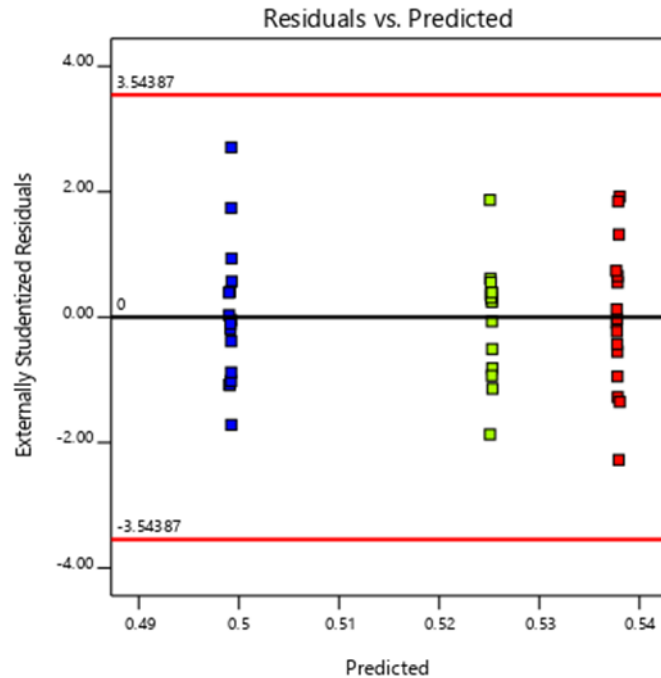


Figura 4. Valores residuales vs valores predichos para la fracción de metano.

El gráfico de valores residuales Vs predichos de la Figura 5 para la composición de metano en función del tipo de biomasa, muestra de nuevo cierto grado de aleatoriedad, con distribuciones parciales y dispersiones adecuadas dentro de los límites. Seguidamente el grafico de los valores residuales Vs predichos de la Figura 6, para la concentración de CH₄ en función del flujo de biomasa, muestra que no hay una distribución uniforme en los puntos, evidenciando alta dispersión y por lo tanto efectos estadísticos que no son significativos.

Design-Expert® Software

CH4

Color points by value of

CH4:

0.4989912  0.5381527

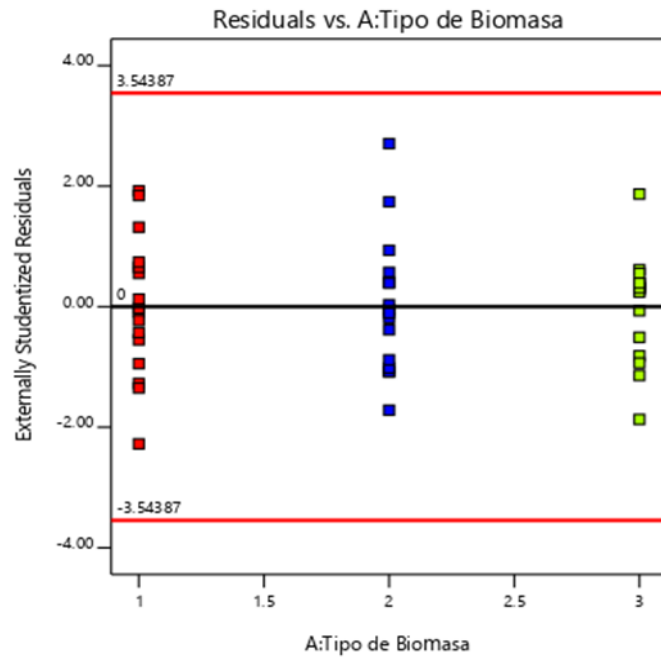


Figura 5. Valores residuales vs predichos para la fracción de metano en términos del tipo de biomasa.

Design-Expert® Software

CH4

Color points by value of

CH4:

0.4989912  0.5381527

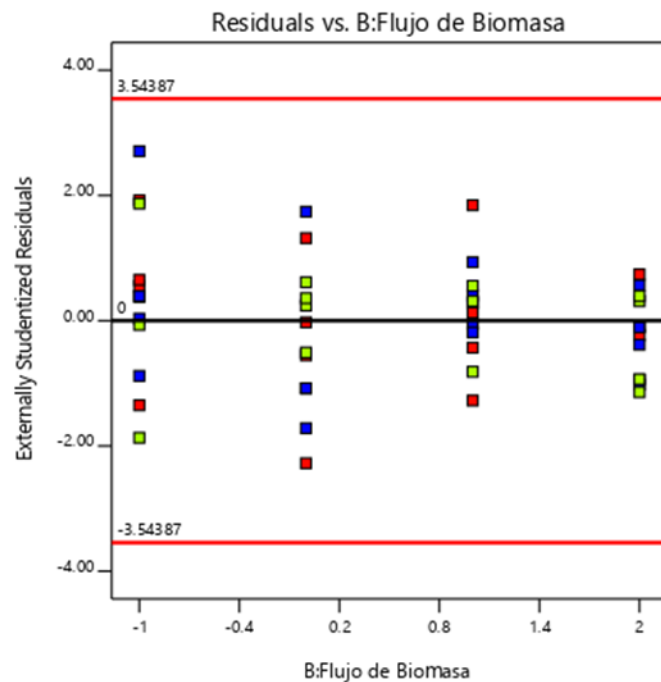


Figura 6. Valores residuales vs predichos para la fracción de metano en términos del flujo biomasa.

Los residuales para la temperatura de entrada del proceso de la Figura 7 mostraron diferentes distribuciones de los residuales, indicando que esta variable no se ajusta a un análisis ANOVA y no sería indicado utilizar esta variable para la construcción

de ningún modelo empírico dada la distribución no uniforme.

Design-Expert® Software

CH4

Color points by value of
CH4:

0.4989912  0.5381527

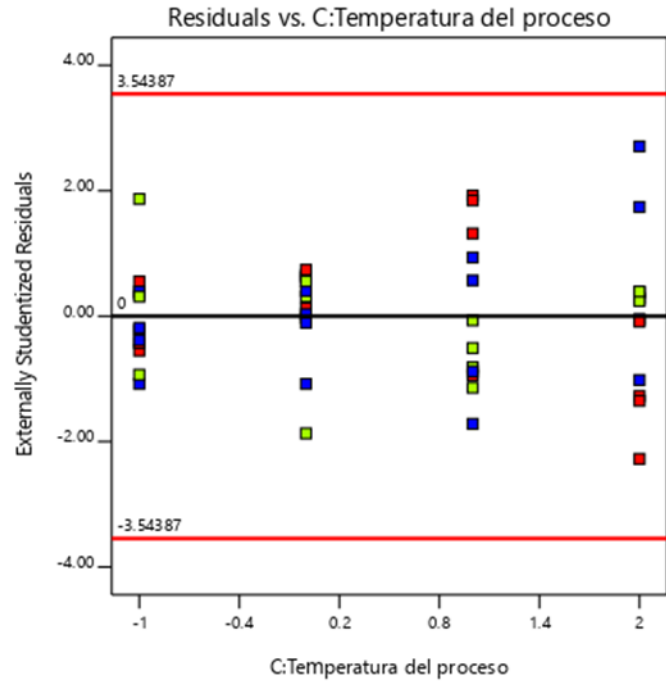
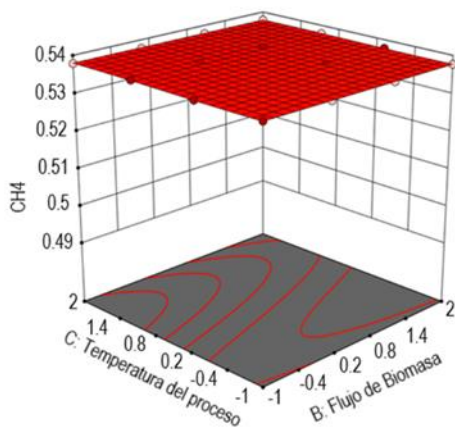
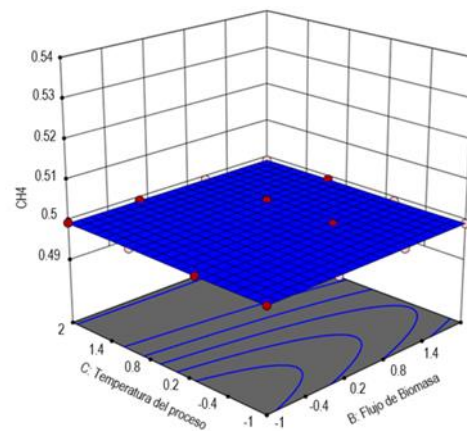


Figura 7. Valores residuales vs predichos para la fracción de metano en términos de la temperatura de entrada.

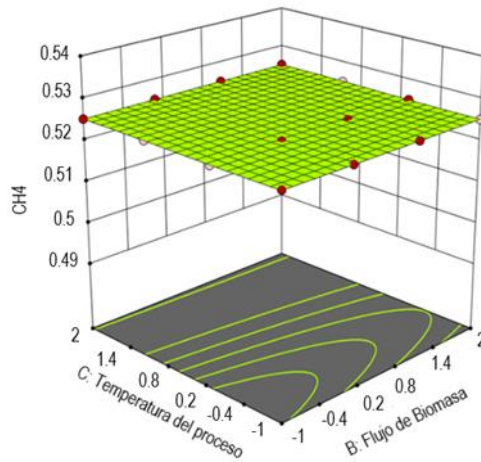
Como la variable Tipo de biomasa tuvo un mayor grado de significancia en la fracción de metano se compararon los tres tipos de biomasa en la figura 8



(a)



(b)



(c)

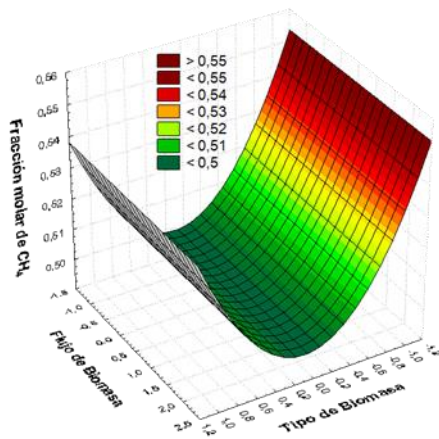
Figura 8. Valor máximo para el CH₄ para los tres tipos de biomazas y su funcionalidad: estiércol de cerdo (8a), estiércol de vaca (8b), bagazo de caña (8c)

La figura 8 (a) muestra que con el estiércol de cerdo, la fracción molar de CH₄ tiene un valor promedio de 0,537 siendo este el más alto respecto a las demás biomazas estudiadas, la figura (b) muestra que con el estiércol de vaca, la fracción molar de CH₄ tiene un valor promedio de 0,499 siendo el valor más bajo de las tres biomazas y la figura (c) muestra que con el bagazo de caña, la fracción molar de CH₄ tiene un valor promedio de 0,525 siendo así el valor intermedio entre las tres, también se puede observar en la figura 8 ciertas curvaturas que indican que la Temperatura de entrada y el Flujo de biomasa afectan la fracción de metano solamente que en menor medida a comparación del Tipo de biomasa.

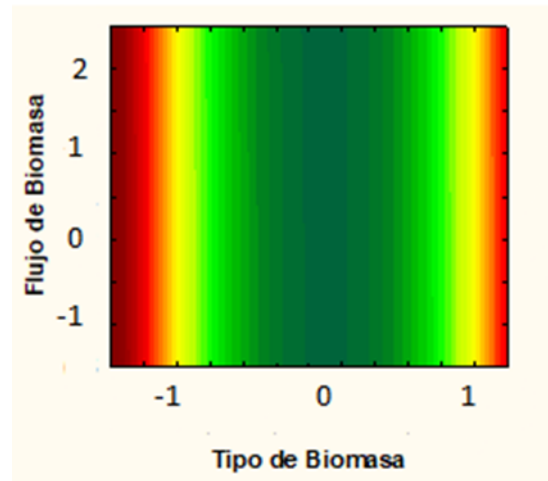
Fue desarrollado un análisis de las variables de respuesta en función de los parámetros de entrada de la simulación, utilizando un análisis basado en superficies de contorno sobre las diferentes interacciones entre las variables, Los colores más marcados de la superficie indican los valores máximos para las variables medidas y los colores más suaves indican opuestamente los valores más pequeños o tendencias del modelo.

La primera interacción que fue analizada muestra el efecto del flujo de biomasa

variado en la simulación y el tipo de biomasa utilizada en la simulación con la fracción molar de salida en la corriente de Biogás, la cual es mostrada en la Figura 9, evidenciando la superficie de respuesta 9(a) y su respectivo mapa de contorno 9(b), tomando valores desde 0 hasta 0,55.



(a)



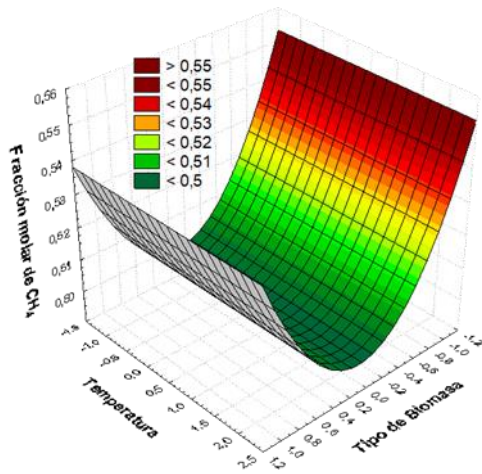
(b)

Figura 9. Efectos combinados del Flujo de biomasa y Tipo de biomasa sobre la fracción molar de CH_4 :

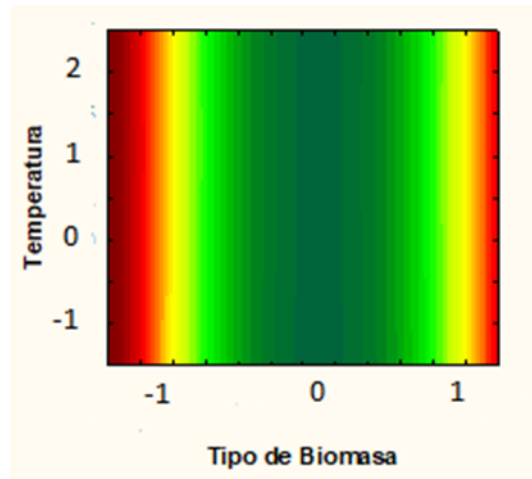
(a). Superficie de respuesta. (b). Mapa de contorno

Para esta interacción se pudo observar que la variable Tipo de biomasa es la que influye en que haya una mayor o menor fracción molar de CH_4 en la corriente de salida del biodigestor, en comparación con la variable Flujo de biomasa que en este caso no tiene efecto, sin presentar gradientes en el eje de dicha variable, se puede afirmar que el Tipo de biomasa correspondiente al estiércol de cerdo(-1) es el que genera una mayor concentración de metano en la corriente de salida, seguido del bagazo de caña y finalmente del estiércol de vaca.

La figura 10 muestra el efecto que tienen la temperatura de entrada y el tipo de Biomasa en la fracción molar de CH_4 , mediante una superficie de respuesta en 3D y un mapa de contorno mostrando donde ocurre la mayor concentración de metano en la corriente de salida, mostrando poca variabilidad a las condiciones estudiadas.



(a)



(b)

Figura 10. Efectos combinados de la Temperatura de entrada y el Tipo de biomasa sobre la fracción molar de CH_4 : (a). Superficie de respuesta. (b). Mapa de contorno

De Manera similar al caso anterior se pudo observar que la variable Tipo de biomasa es la más influyente en comparación con la Temperatura de entrada, particularmente para el tipo de biomasa correspondiente al estiércol de cerdo (-1) se ratifica que es la que genera mayor concentración de metano, seguido del bagazo de caña (1) y finalmente del estiércol de vaca

La figura 11 muestra el efecto que tienen las variables combinadas Temperatura de entrada y Flujo de Biomasa en la fracción molar de CH_4 , siendo la figura 11(a) una superficie de respuesta y la Figura 11(b) un mapa de contorno

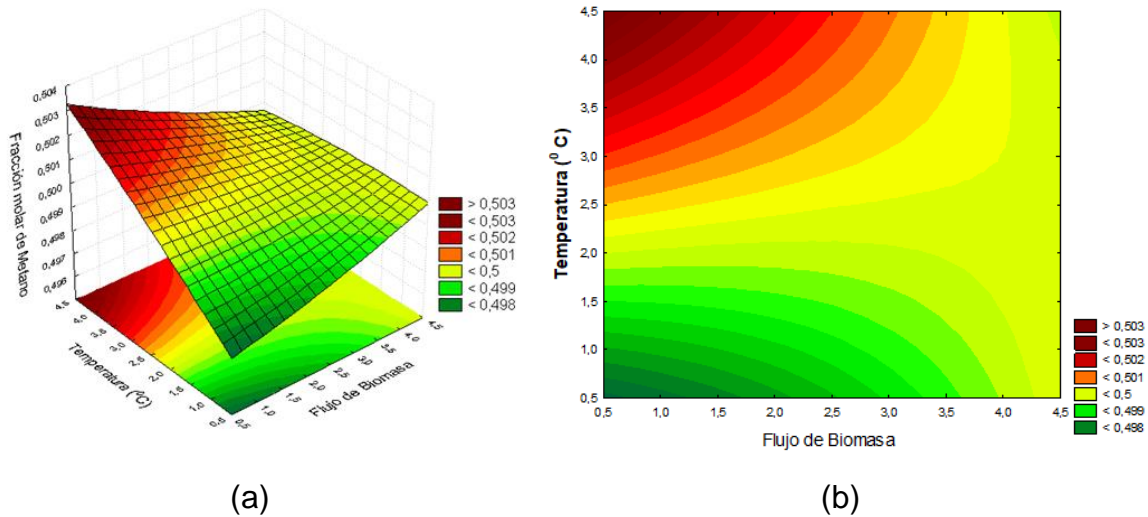


Figura 11. Efectos combinados de Flujo de biomasa y Temperatura sobre la fracción molar de CH₄ :

(a). Superficie de respuesta. (b). Mapa de contorno

Teóricamente valores mayores de la temperatura y flujos de biomasa bajos conducen a una mayor concentración de metano, esto es una respuesta esperada debido a que la cinética de reacción depende de T, sin embargo, si se aumentan excesivamente los flujos, el volumen del reactor que es fijo no consigue procesar las altas cantidades de Biomasa, generando tiempo de residencia menores, indicando que puede haber una concentración mayor (más rojo) o menor fracción (más verde) de CH₄ a determinado Flujo de biomasa y determinada Temperatura de entrada.

8.1.2. Análisis ANOVA para la composición de dióxido de carbono (CO₂) obtenida:

La Tabla 10 Muestra los parámetros obtenidos para el análisis ANOVA de las fracciones de dióxido de carbono en la corriente de salida denominada "BIOGAS" en el diagrama de flujo.

Tabla 10. Resultados del análisis ANOVA para el dióxido de carbono.

Fuente	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado medio	Valor de Fisher	Significancia (Valor-p)	
Modelo	0,0367	12	0,0031	2,33E+09	<0,0001	significante
A- Tipo de Biomasa	0,0367	2	0,0184	1,40E+10	<0,0001	
B-Flujo de Biomasa	7,64E-06	1	7,64E-06	5,80	0,0214	
C- Temperatura de entrada	3,30E-05	1	3,298 E-08	25,04	<0,0001	
AB	3,02E-05	2	1,51E-05	11,47	0,0001	
AC	1,04E-05	2	5,22E-05	3,96	0,0282	
BC	1,19E-05	1	1,19E-05	9,01	0,0049	
ABC	1,25E-05	2	6,27E-06	4,76	0,0149	
C³	7,70E-06	1	7,70E-06	5,85	0,0209	
Residual	4,61E-05	35	1,32E-06			
Cor Total	0,0367	47				

De acuerdo con el ANOVA factorial se observó diferencias significativas en la fracción de CO₂ en función de la significancia estadística para la variable Tipo de biomasa (F: 1,40E+10, p < 0.001). Las otras variables presentadas en la tabla y sus correlaciones como son : Tipo de biomasa-Flujo de biomasa, Interacción Tipo de biomasa-Temperatura de entrada, Interacción Flujo de biomasa-Temperatura de entrada, Interacción Tipo de biomasa-Flujo de biomasa-Temperatura de entrada y Temperatura de entrada al cubo también fueron significativas, en menor proporción a comparación del Tipo de biomasa debido a que mostraron un valor del parámetro p que mide la significancia, menor a 0,05.

El análisis de residuales para la fracción de dióxido de carbono, indico que el modelo predice adecuadamente el comportamiento como lo muestra la Figura 12.

Design-Expert® Software

CO2

Color points by value of
CO2:

0.2577147  0.3217039

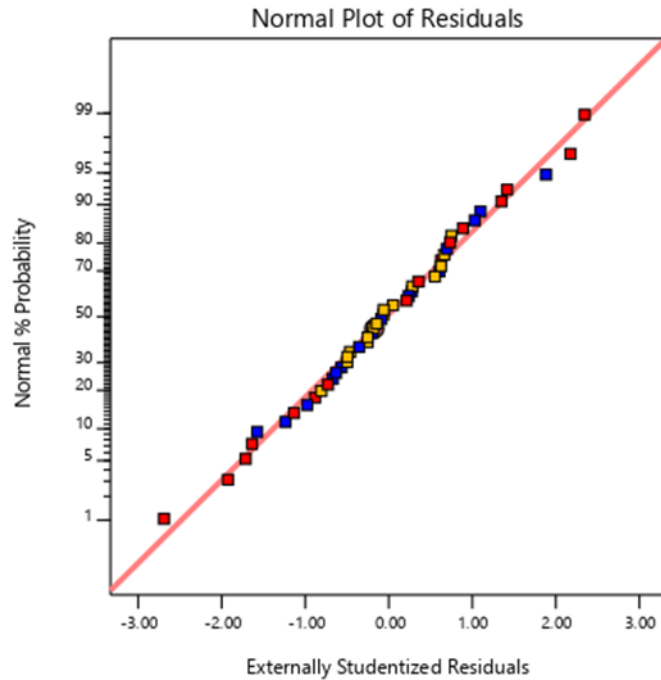


Figura 12. Probabilidad normal de los residuos para la fracción molar de dióxido de carbono.

Cualquier desviación uniforme de una línea recta representa un comportamiento que no es predicho con el modelo del ANOVA; en este caso se ve que los residuos se ubican alrededor de la recta normal, lo cual ocurre al no tener fluctuaciones experimentales por tratarse de un modelo determinístico dado por una simulación con variables parametrizadas como el volumen del reactor.

En el análisis de residuales versus los valores predichos fue observado que los residuos están distribuidos aleatoriamente, probablemente a que el efecto de aleatoriedad pesa más sobre el tipo de biomasa que sobre las otras variables, también se observó que no hay valores atípicos ya que no sobrepasan los límites como lo muestra la Figura 13, de la misma forma el gráfico de valores residuales Vs predichos de la Figura 14 para la composición de dióxido de carbono en función del tipo de biomasa, muestra de nuevo cierto grado de aleatoriedad, con distribuciones parciales y dispersiones aceptables dentro de los límites.

Design-Expert® Software

CO2

Color points by value of
CO2:

0.2577147  0.3217039

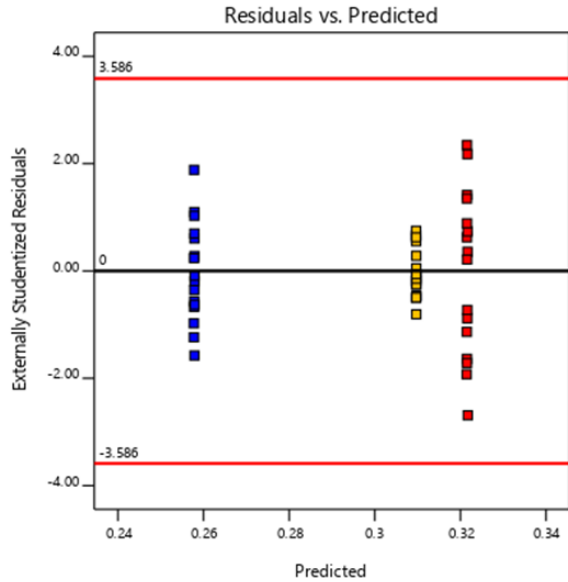


Figura 13. Valores residuales vs valores predichos para la fracción de dióxido de carbono.

Design-Expert® Software

CO2

Color points by value of
CO2:

0.2577147  0.3217039

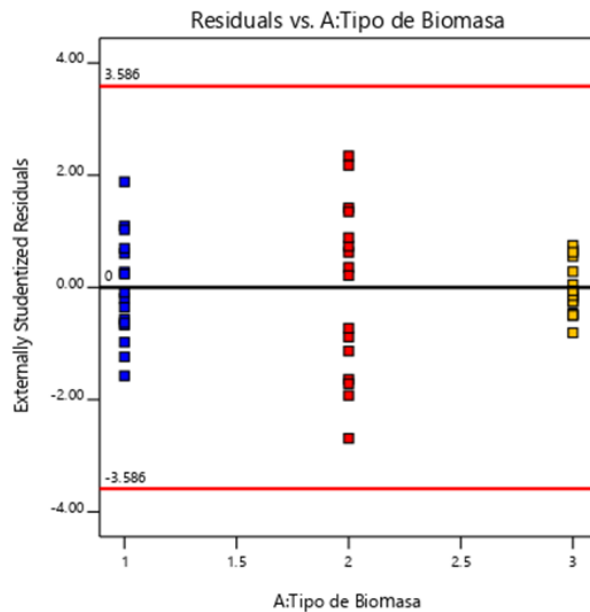


Figura 14. Valores residuales vs predichos para la fracción de dióxido de carbono en términos del tipo de biomasa.

El grafico de los valores residuales Vs predichos de la Figura 15, para la concentración de CO₂ en función del flujo de biomasa, muestra que no hay una distribución uniforme en los puntos, mostrando alta dispersión y por lo tanto efectos

estadísticos que no son significativos.

Design-Expert® Software

CO2

Color points by value of
CO2:

0.2577147  0.3217039

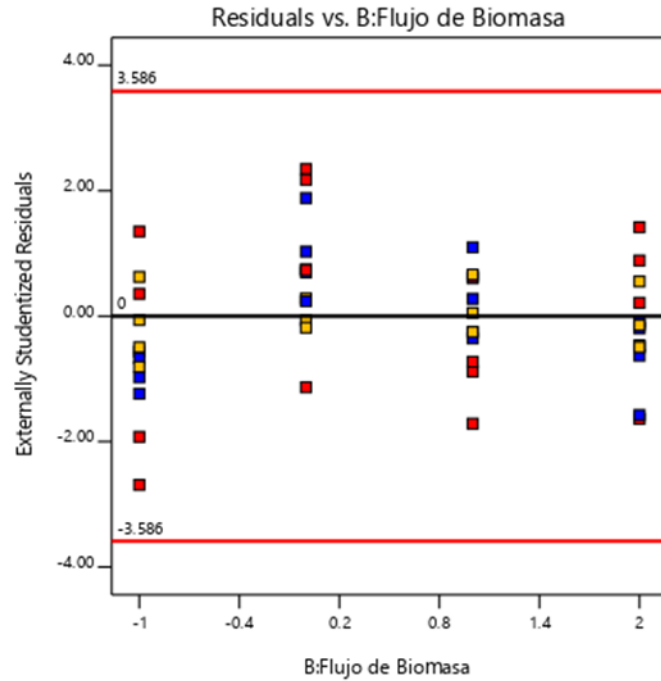


Figura 15. Valores residuales vs predichos para la fracción de dióxido de carbono en términos del flujo biomasa.

Los residuales en función de la temperatura de entrada del proceso de la Figura 16 mostraron diferentes distribuciones, señalando que esta variable no se ajusta a un análisis ANOVA y no sería viable utilizar esta variable para la construcción de ningún modelo empírico dada la distribución no uniforme.

Design-Expert® Software

CO2

Color points by value of
CO2:

0.2577147  0.3217039

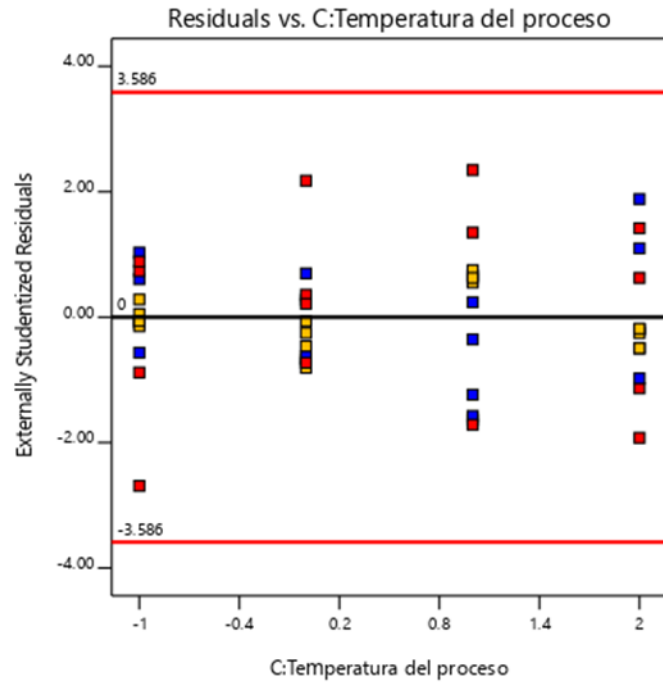
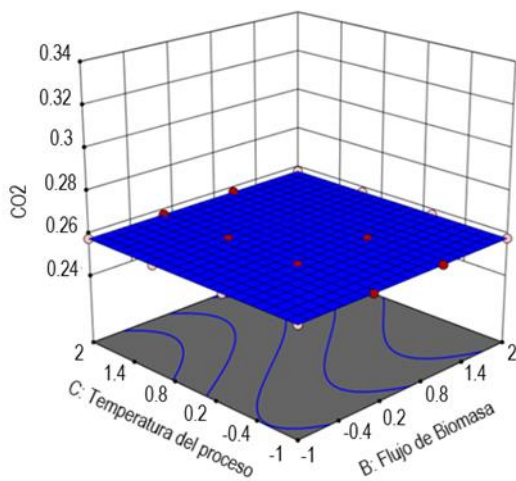
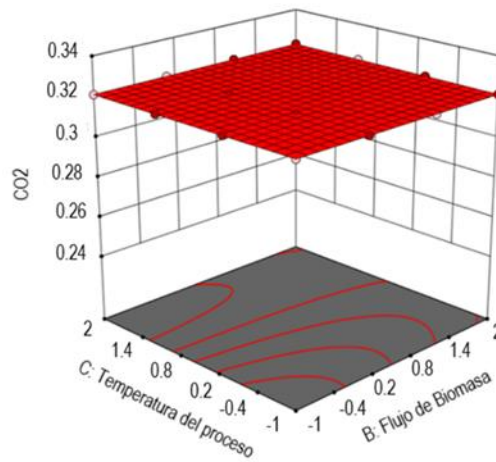


Figura 16. Valores residuales vs predichos para la fracción de dióxido de carbono en términos de la temperatura de entrada.

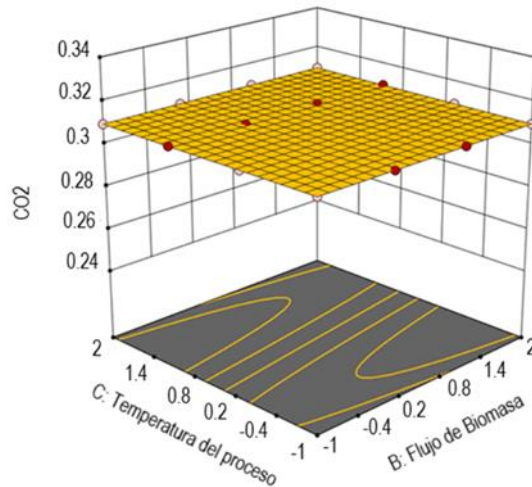
Como la variable Tipo de biomasa resulto de una gran significancia en la fracción de CO₂ de acuerdo al análisis ANOVA se comparó la fracción promedio entre los tres tipos de biomasa en la figura 17



(a)



(b)

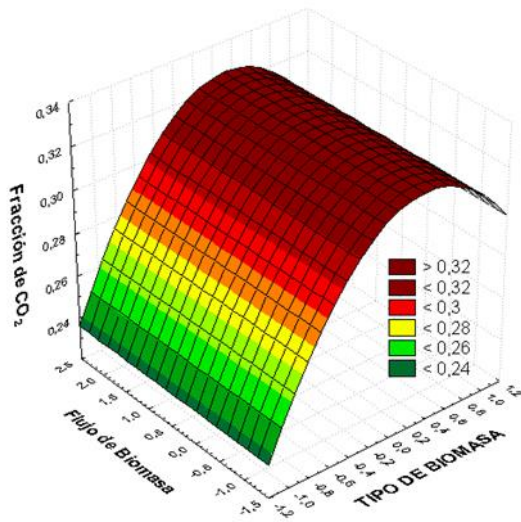


(c)

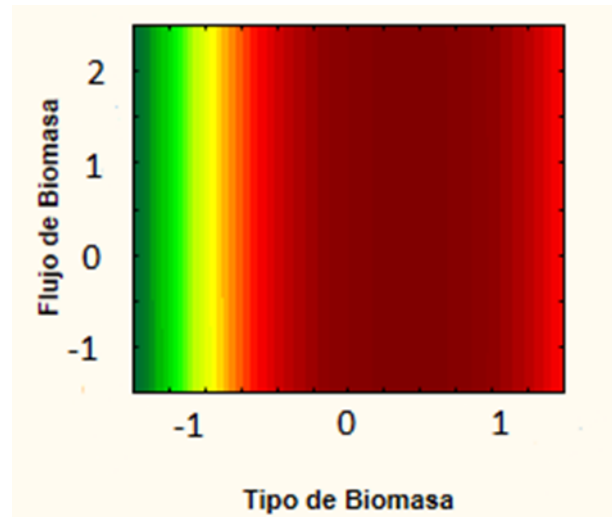
Figura 17. Valor máximo para el CO₂ para los tres tipos de biomazas y su funcionalidad: estiércol de cerdo (19a), estiércol de vaca (19b), Bagazo de caña (19c)

La figura 17 (a) muestra que con el estiércol de cerdo, la fracción molar de CO₂ tiene un valor promedio de 0,257 siendo este el más bajo respecto a las demás biomazas estudiadas, la figura 17 (b) muestra que con el estiércol de vaca, la fracción molar de CO₂ tiene un valor promedio de 0,321 siendo el valor más alto de las tres biomazas y la figura 17 (c) muestra que con el bagazo de caña, la fracción molar de CO₂ tiene un valor promedio de 0,309 siendo el valor intermedio de las tres biomazas, similar a la figura 8, la figura 17 también presentan ligeras curvaturas lo que demuestra la significancia de la Temperatura de entrada y el Flujo de biomasa.

El análisis de las superficies de respuesta con sus respectivas interacciones mostró las diferentes tendencias encontradas. La figura 18 muestra el efecto de la interacción entre las dos variables Flujo de Biomasa y Tipo de Biomasa en la fracción molar de CO₂ en la corriente de Biogás, la figura 18(a) es la superficie de contorno y la figura 18(b) es un mapa de contorno de dichas variables.



(a)



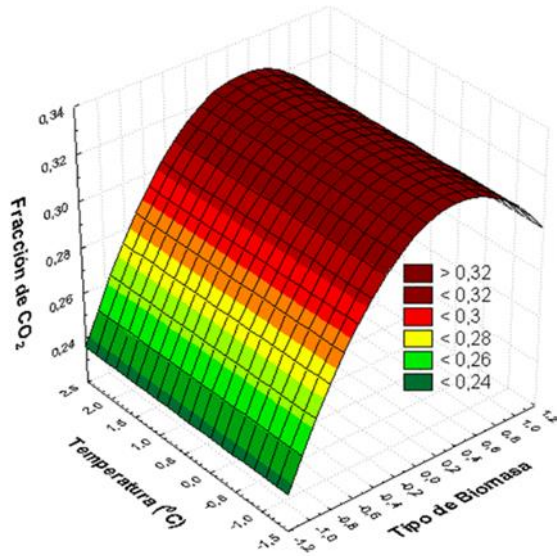
(b)

Figura 18. Efectos combinados del Flujo de biomasa y Tipo de biomasa sobre la fracción molar de CO₂

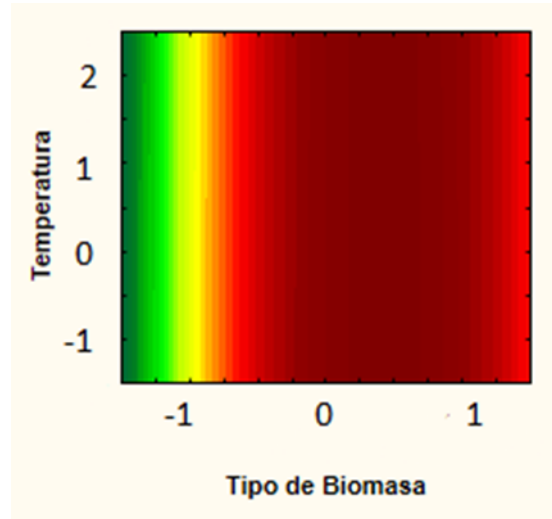
(a) Superficie de contorno (b) Mapa de contorno

Para esta interacción fue observado que la variable Tipo de biomasa influyo más significativamente en la fracción molar de CO₂ obtenida en el proceso, en contraste, el Flujo de biomasa tuvo un efecto imperceptible, el estiércol de vaca generó una mayor fracción molar de CO₂ en la corriente de salida de Biogás, seguida del bagazo de caña y del estiércol de cerdo.

La figura 19 muestra el efecto de las dos variables Temperatura de entrada y Tipo de Biomasa en la fracción molar de CO₂



(a)



(b)

Figura 19. Efectos combinados de la Temperatura de entrada y Tipo de biomasa sobre la fracción molar de CO_2 : (a) Superficie de contorno (b) Mapa de contorno.

Fueron observadas tendencias similares y efectos similares que los encontrados en el análisis de la Figura 18, el efecto del tipo de biomasa es el único efecto significativo en este análisis. Finalmente, para correlacionar el comportamiento entre la Temperatura de entrada y el Flujo de entrada de Biomasa que afecta la cinética de la reacción y el tiempo de residencia, se estudiaron las interacciones entre estas variables sobre la formación de CO_2

La figura 20 muestra el efecto resultante de las dos variables Temperatura y Flujo de Biomasa en la fracción molar de CO_2 , los gráficos de la fracción de CO_2 depende en gran manera de ambas variables indicando que para menores temperaturas y menores flujos se aumenta la fracción molar de CO_2 o se produce mayor cantidad en el biogás, esto ocurre porque la cinética favorece a bajas temperaturas su formación, reduciendo la formación de metano como efecto adverso y su poder calorífico.

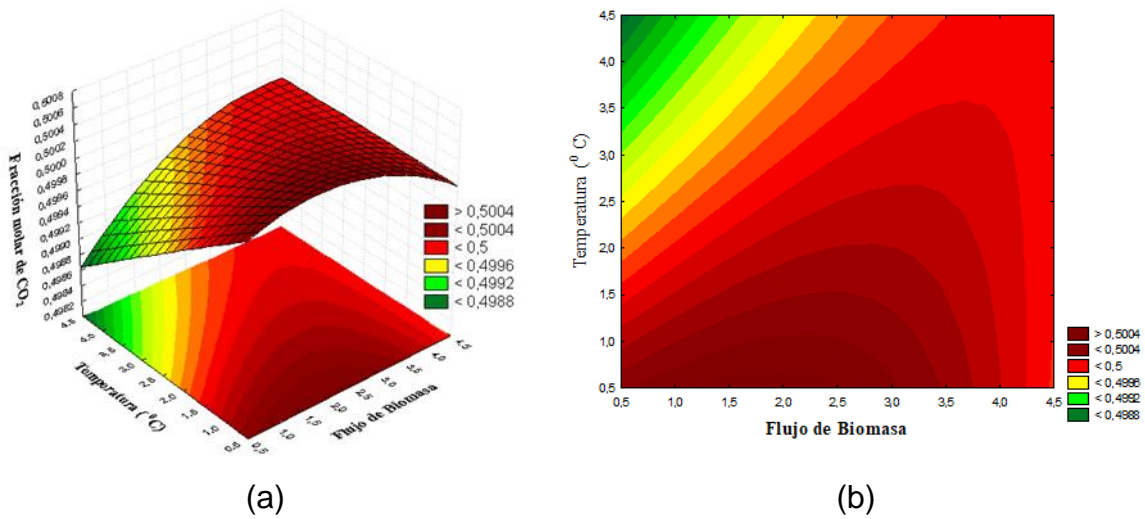


Figura 20. Efectos combinados de Flujo de biomasa y Temperatura sobre la fracción molar de CO₂

(a) Superficie de contorno y (b) Mapa de contorno

8.1.3. Análisis ANOVA para el poder calorífico LHV:

La Tabla 11 muestra los parámetros obtenidos para el análisis ANOVA del poder calorífico neto inferior obtenido en la corriente de salida denominada “BIOGAS” en el diagrama de flujo.

Tabla 11. Resultados del análisis ANOVA para el poder calorífico neto inferior

Fuente	Suma de cuadrados	df	Cuadrado medio	Valor de Fisher	Valor-p	
Modelo	1,36E+20	5	2,71E+19	1,97E+09	< 0,0001	significante
A-Tipo de Biomasa	1,36E+20	2	6,79E+19	4,93E+09	< 0,0001	
C²	9,98E+13	1	9,98E+13	7,26	0,0101	
AC²	1,44E+14	2	7,17E+13	5,21	0,0095	
Residual	5,78E+14	42	1,38E+13			
Cor Total	1,36E+20	47				

De acuerdo con el ANOVA factorial se pudo observar que hay diferencias significativas en el poder calorífico neto inferior en función de la significancia estadística para la variable Tipo de biomasa (F: 4,93E+09, p < 0.001). Las otras variables presentadas en la tabla como la Temperatura de entrada al cuadrado y la


Interacción Tipo de biomasa-Temperatura de entrada al cuadrado también fueron significativas, solo que en menor medida a comparación del Tipo de biomasa debido a que tuvieron un Valor p menor a 0,05.

Para validar el ANOVA realizado se utilizó el software Statistica 9.0, la figura 21, muestra los residuos, los cuales no siguen una distribución normal y presentan valores atípicos, por lo tanto, el análisis ANOVA no es adecuado para analizar los datos experimentales en este caso.

Design-Expert® Software

LHV

Color points by value of LHV:

4.500906E+08  5.735296E+08

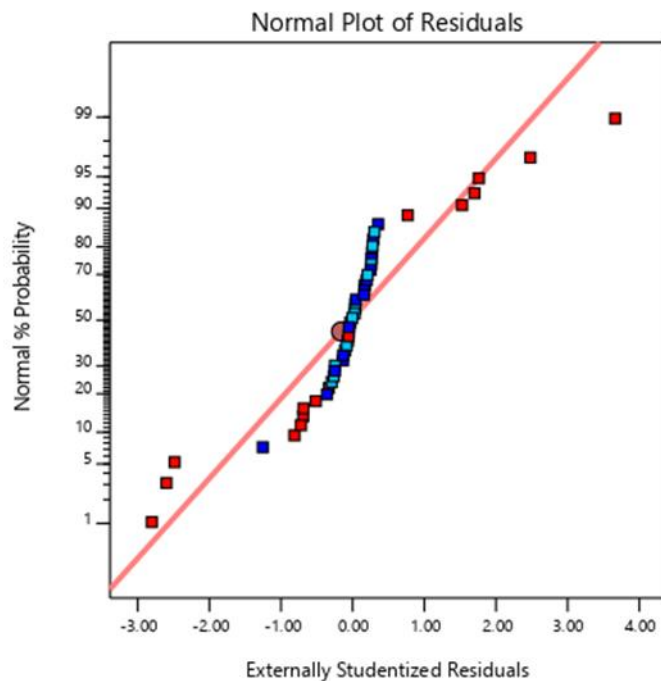


Figura 21. Probabilidad normal de los residuos para el poder calorífico neto inferior (LHV).

Las discrepancias se presentan debido a que el poder calorífico es una variable que depende del calor latente de vaporización del agua como estado de referencia y de la composición elemental de la biomasa la cual es heterogénea al contener carbohidratos, lípidos y grasas y compuestos fenólicos; esto hace que se generen perturbaciones adicionales que afectan la simulación, cuyos datos experimentales para el LHV no siguen el modelo matemático propuesto por el análisis ANOVA,

Debido a estas discrepancias, fue calculado el LHV esperado para el gas de salida

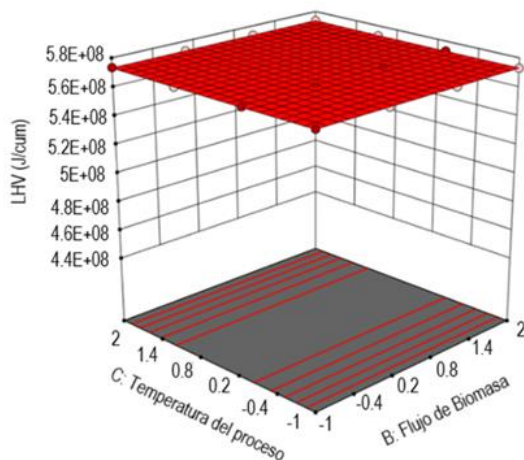
con modelos empíricos, reportados por Basu et al (2010), obteniéndose los siguientes resultados:

Tabla 12. Comparación del poder calorífico neto inferior de las Biomosas.

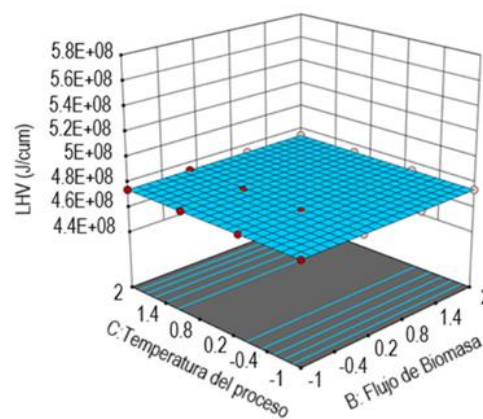
Poder calorífico neto inferior (kJ/kg)			
Método	Estiércol de vaca	Estiércol de cerdo	Bagazo de caña
Aspen Plus	17741	21769,2	17648,9
Modelo de Prabu Basur	16403,7	19346,6	16397,9
Error	7,53%	11,1%	7,08%

Como los valores de la simulación son cercanos a los empíricos se consideró el modelo valido.

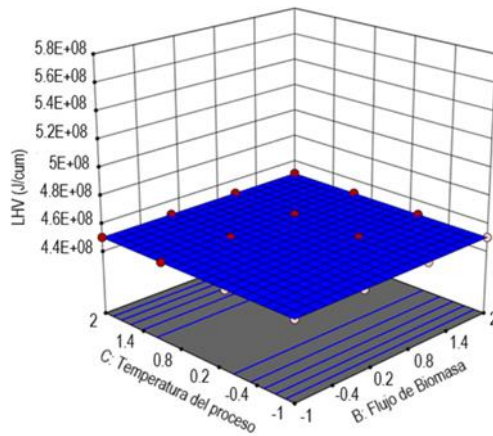
El efecto del tipo de biomasa se observa en la figura 22, donde el Tipo de biomasa = -1 (estiércol de cerdo), mostro un poder calorífico neto inferior de $5.7E+08$ J/kmol siendo este el más alto respecto a la biomasa de vaca (0) y la biomasa de bagazo de caña (1)



(a)



(b)



(c)

Figura 22. Comportamiento del LHV para las tres biomásas estudiadas: (a). residuos de cerdo (b). Residuos de vaca (c) Bagazo de caña (-1)

Para el estiércol de vaca, el poder calorífico neto inferior tuvo un valor promedio de $4.7E+08$ J/Kmol siendo un valor más bajo que la biomasa -1 pero más alto que el bagazo de caña (1). Por otro lado, la figura c muestra que, con el bagazo de caña, el poder calorífico neto inferior tuvo un valor promedio de $4.5E+08$ J/Kmol siendo el valor más bajo de las tres biomásas, a diferencia de la figura 8 y la figura 17 se puede notar que no hay curvaturas esto se debió a que las variables Temperatura de entrada y Flujo de biomasa no fueron significantes.

La figura 23 muestra el efecto de la interacción entre las dos variables Flujo de Biomasa y Tipo de Biomasa en el poder calorífico neto inferior, la figura 23(a) es una superficie de contorno y la figura 23(b) es una mapa de contorno de las variables, los valores del LHV abarcan desde un valor menor a $4,6E8$ J/Kmol hasta un valor mayor a $6E8$ J/Kmol, se pudo observar que el Tipo de biomasa es la más influyente, en contraste con Flujo de biomasa que en este caso tuvo un efecto imperceptible, por eso se ven unas líneas rectas, observando la gráfica se determinó que, el Tipo de biomasa -1 correspondiente al estiércol de cerdo es el que genera más poder calorífico, seguido del Tipo de biomasa 0 correspondiente al estiércol de vaca y el Tipo de biomasa 1 correspondiente al bagazo de caña.

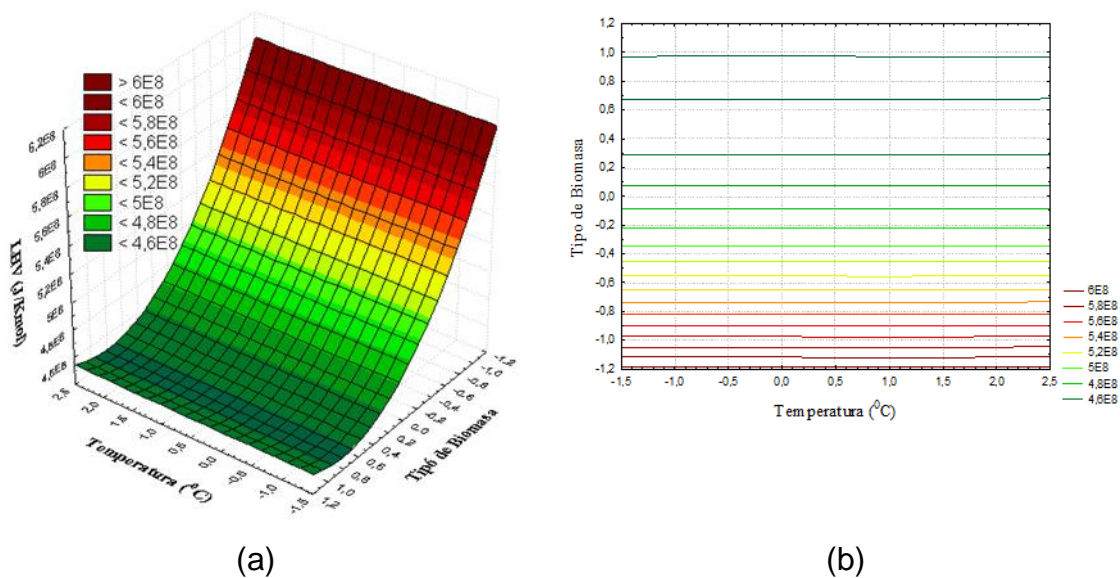


Figura 23. Efectos combinados del Flujo de biomasa y Tipo de biomasa sobre el poder calorífico LHV

(a). Superficie de contorno (b) Mapa de contorno

Los valores energéticos de entalpía, entropía y energía libre de Gibbs mostraron un comportamiento similar a anterior, cuya única variable importante fue el tipo de biomasa utilizada, esto tiene sentido ya que la cinética de la reacción es predominante por la composición de la biomasa (Concentraciones de reactivos) y temperatura de reacción, la cual no fue alterada en las simulaciones realizadas. Adicionalmente el equilibrio químico se ve afectado por las etapas de hidrolisis y metanogénesis dadas por la composición de los sustratos, así se determinó que el Tipo de biomasa -1 correspondiente al estiércol de cerdo es el que genera más poder calorífico, seguido del Tipo de biomasa 0 correspondiente al estiércol de cerdo y después Tipo de biomasa 1 correspondiente al bagazo de caña.

8.1.4. Análisis ANOVA para la Energía Libre de Gibbs de la corriente de salida:

La Tabla 13 muestra los parámetros obtenidos para el análisis ANOVA de la energía libre de Gibbs obtenida en la corriente de salida denominada "BIOGAS" en el diagrama de flujo.

Tabla 13. Resultados del análisis ANOVA para la energía de Gibbs.

Fuente	Suma de cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado medio	Valor de Fisher	Valor-p	
Modelo	5,27E+18	9	5,86E+17	3,28E+09	<0.0001	significante
A- Tipo de Biomasa	5,27E+18	2	2,64E+18	1,47E+07	<0.0001	
B-Flujo de Biomasa	9,99E+11	1	9.994E+0.8	5.59	0.0233	
C-Temperatura de entrada	3,13E+12	1	3,13E+12	17,53	0.0002	
AB	3,32E+12	2	1,66E+12	9,3	0.0005	
AC	1,24E+12	2	6,19E+11	3,46	0.0416	
BC	1,20E+12	1	1,20E+12	6,73	0.0134	
Residual	6,79E+12	38	1,79E+11			
Cor Total	5,27E+18	47				

De acuerdo con el ANOVA factorial se pudo observar que hay diferencias significativas en la energía libre de Gibbs en función de la significancia estadística para la variable Tipo de biomasa (F: 1,47E+07, $p < 0.001$). Las otras variables presentadas en la tabla como el Flujo de biomasa, la Temperatura de entrada, Interacción Tipo de biomasa-Flujo de biomasa, Interacción Tipo de biomasa-Temperatura de entrada y Interacción Flujo de biomasa-Temperatura de entrada también fueron significativas, solo que en menor medida a comparación del Tipo de biomasa debido a que tuvieron un Valor p menor a 0,05.

El análisis de residuales para la energía libre de Gibbs, indico que el modelo predice adecuadamente el comportamiento, como lo muestra la Figura 24.

Design-Expert® Software

dG

Color points by value of

dG:

-1.8984E+08  -1.659973E+08

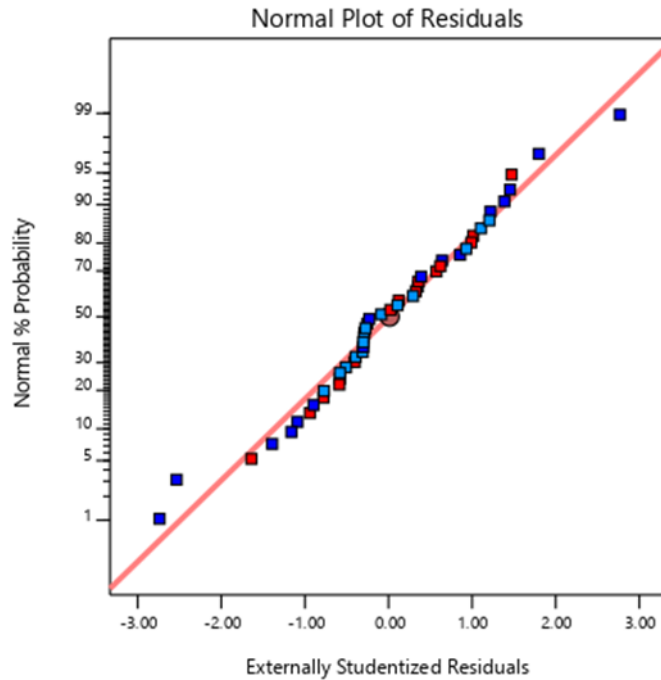


Figura 24. Probabilidad normal de los residuos para la energia libre de Gibbs.

Puntos muy lejanos de la linea en la grafica indicarian un comportamiento no normal; en este caso se ve que los residuos se ubican cerca de la recta normal, lo cual ocurre al no tener fluctuaciones experimentales.

En el análisis de los valores residuales Vs los valores predichos para la simulación, se observó cierto grado de aleatoriedad, con puntos no uniformemente distribuidos, probablemente a que el efecto de aleatoriedad pesa más sobre el tipo de biomasa que sobre las otras variables, también se observó que no existen valores atípicos ya que no salen de los límites como lo muestra la Figura 25.

Design-Expert® Software

dG

Color points by value of
dG:

-1.8984E+08  -1.659973E+08

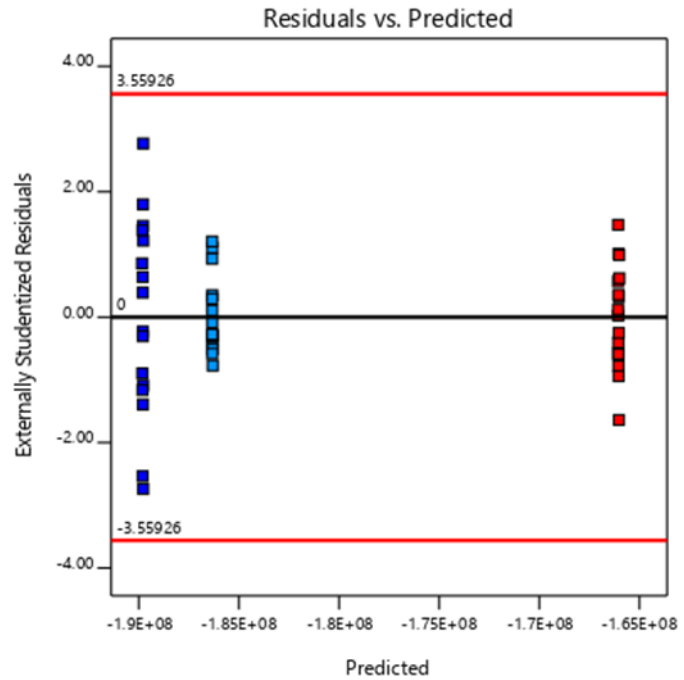


Figura 25. Valores residuales vs valores predichos para la energia libre de Gibbs.

El gráfico de valores residuales Vs predichos de la Figura 26 para la energia libe de Gibbs en función del tipo de biomasa, representa cierto grado de aleatoriedad, con distribuciones parciales y dispersiones adecuadas dentro de los límites.

Design-Expert® Software

dG

Color points by value of
dG:

-1.8984E+08  -1.659973E+08

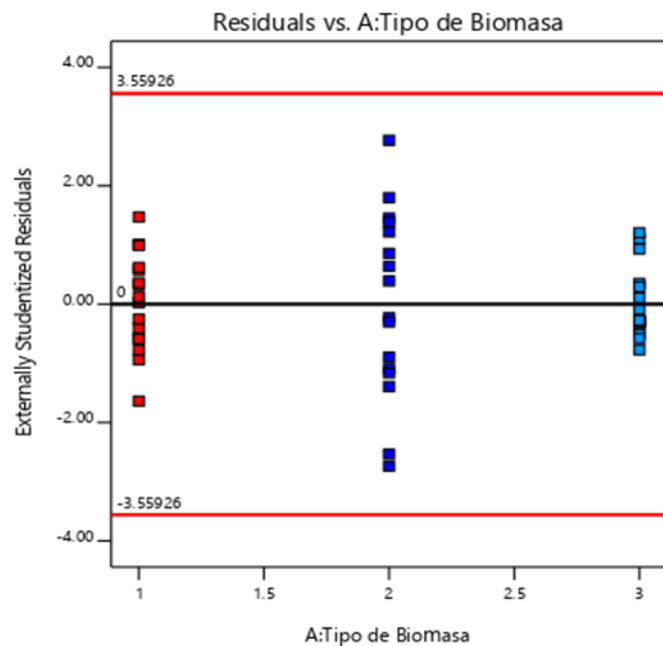


Figura 26 . Valores residuales vs predichos para la energia libre de Gibbs en términos del tipo de biomasa.

El gráfico de los valores residuales Vs predichos de la Figura 27, para la energía libre de Gibbs en función del flujo de biomasa, muestra que no hay una distribución uniforme en los puntos, existe una alta dispersión y por lo tanto efectos estadísticos que no son significativos.

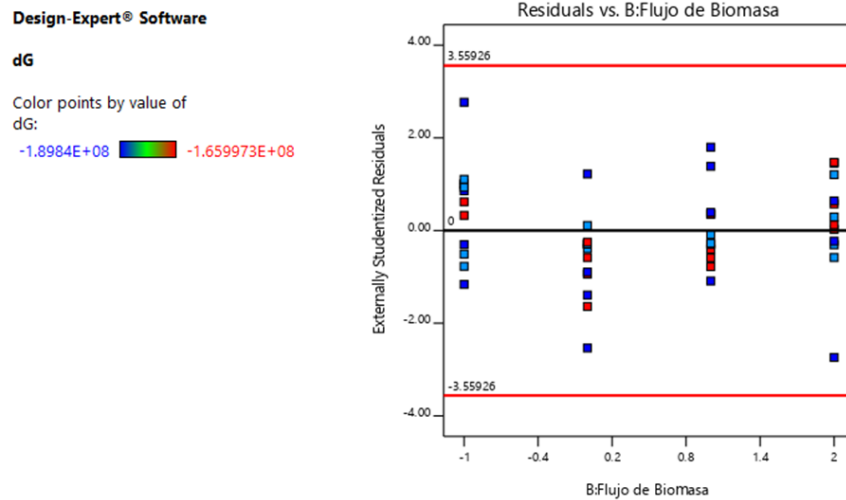


Figura 27. Valores residuales vs predichos para la energía libre de Gibbs en términos del flujo biomasa.

Los residuales en función de la temperatura de entrada del proceso de la Figura 28 mostraron distintas distribuciones de los residuales, señalando que esta variable no se ajusta a un análisis ANOVA y no sería viable utilizar esta variable para la construcción de ningún modelo empírico dada la distribución no uniforme.

Design-Expert® Software

dG

Color points by value of

dG:

-1.8984E+08  -1.659973E+08

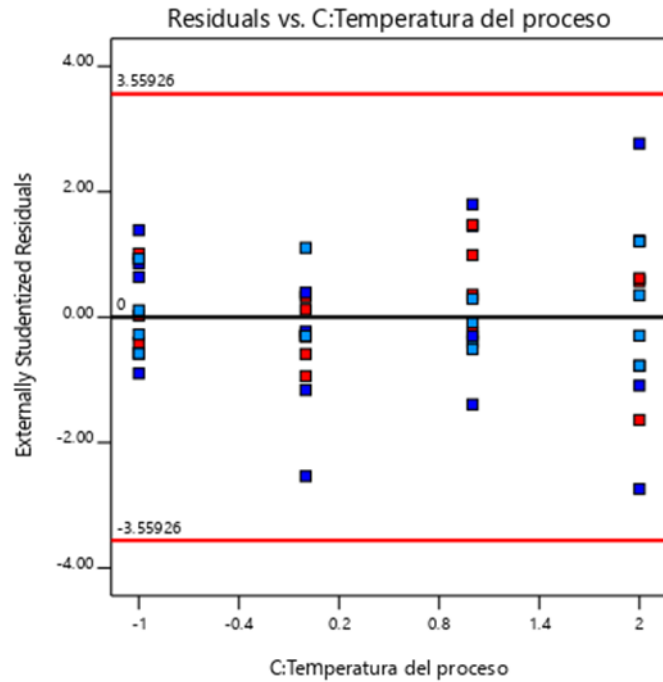
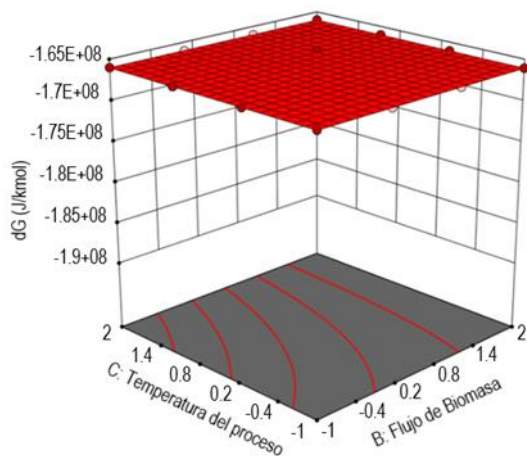
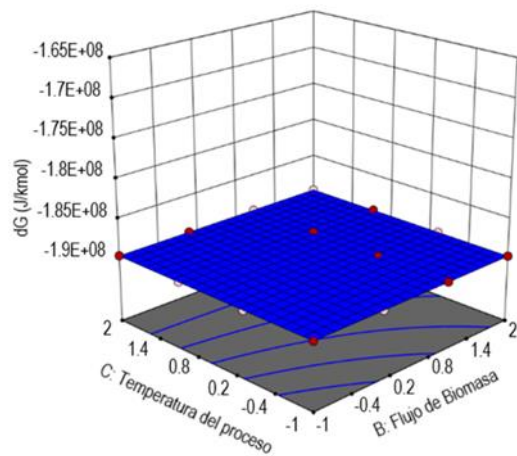


Figura 28. Valores residuales vs predichos para la energía libre de Gibbs en términos de la temperatura de entrada.

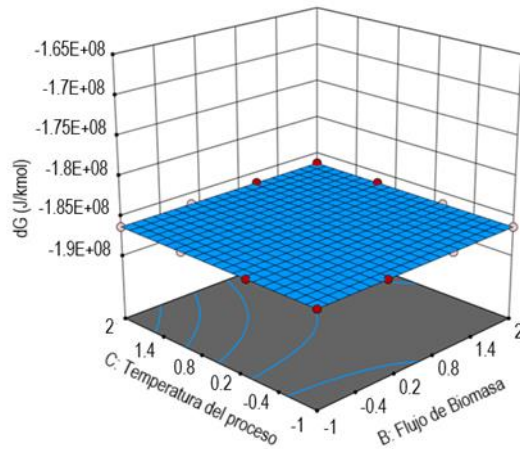
Observando que el Tipo de biomasa siguió siendo la variable que genero mayor significancia en la energía libre de Gibbs se comparo entre las tres biomazas analizadas en la Figura 29



(a)



(b)

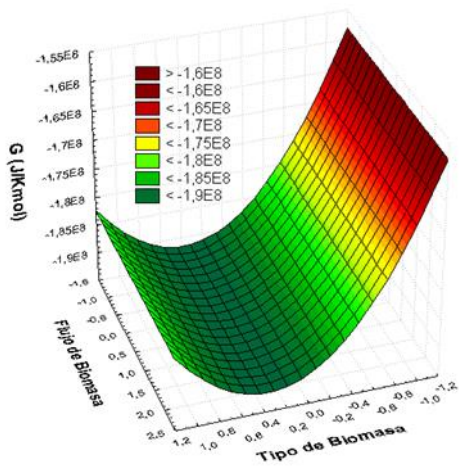


(C)

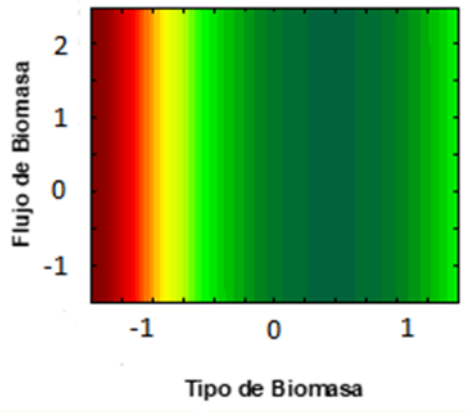
Figura 29. Tendencias de la energía libre de Gibbs del biogas formado en función de las biomazas estudiadas : (33a) Biomasa de cerdo (33b) biomasa de vaca y (33c) Bagazo de caña

La figura 29a muestra que con el estiércol de cerdo, la energía libre de Gibbs tuvo un valor promedio de $-1,66E+08$ J/kmol siendo este el más alto respecto al estiércol de vaca (Figura 29b) y el bagazo de caña (Figura 29c), la energía libre de Gibbs para el estiércol de vaca tuvo un valor promedio de $-1,89E+08$ J/kmol siendo un valor más bajo de las tres biomazas, por otro lado el bagazo de caña, tuvo un valor promedio de energía libre de gibbs de $-1.86E+08$ J/kmol siendo el valor intermedio de las tres biomazas, se observa en la figura 29 curvaturas que demuestran que la temperatura de entrada y flujo de biomasa afectan la energía libre de Gibbs en un menor grado.

La figura 30 muestra el efecto de la interacción entre las dos variables Flujo de Biomasa y Tipo de Biomasa en la energía libre de Gibbs, para esta interacción se pudo observar que la variable Tipo de biomasa es la más influyente, en comparacion con Flujo de biomasa que en este caso tuvo un efecto imperceptible casi nulo, observando la gráfica se determinó que, el Tipo de biomasa -1 correspondiente al estiércol de cerdo es con el que se obtiene mayor energía de Gibbs, seguido del Tipo de biomasa 1 correspondiente al bagazo de caña y el Tipo de biomasa 0 correspondiente al estiércol de vaca.



(a)

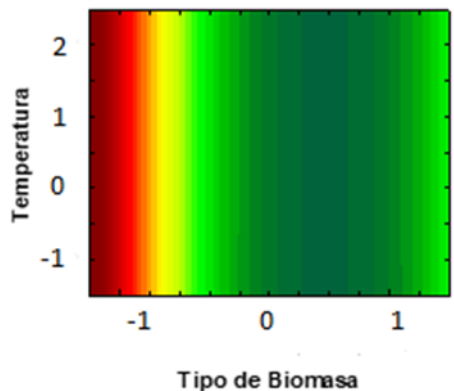
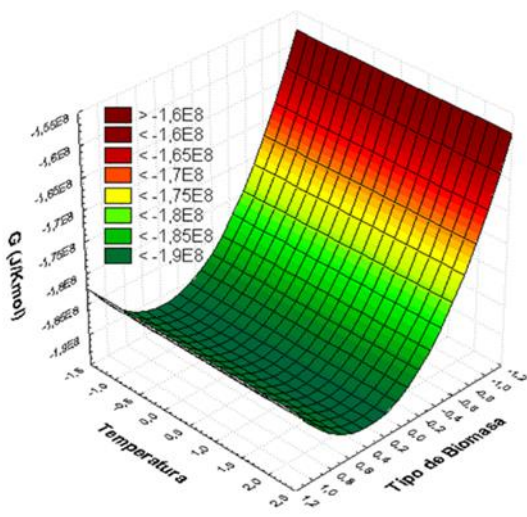


(b)

Figura 30. Efectos combinados del Flujo de biomasa y Tipo de biomasa sobre la energía libre de Gibbs

(a) Superficie de respuesta (b) Mapa de contorno

Por otro lado, la figura 31 se muestra el efecto de las dos variables Temperatura de entrada y Tipo de biomasa donde se asumen valores desde $1,9E8$ J/Kmol hasta un valor máximo de $-1,6E8$ J/Kmol, en la figura 31 se pudo observar que la variable Tipo de biomasa influye más en la energía libre de Gibbs que la Temperatura de entrada que casi no tiene efecto en esta interacción, observando la gráfica se determinó que el Tipo de biomasa (-1) correspondiente al estiércol de cerdo es con la que se obtiene mayor energía libre de Gibbs, seguido del Tipo de biomasa 1 correspondiente al bagazo de caña y después Tipo de biomasa 0 correspondiente al estiércol de vaca.



(a)

(b)

Figura 31. Efectos combinados de la Temperatura de entrada y Tipo de biomasa sobre la energía libre de Gibbs (a) Superficie de respuesta (b) Mapa de contorno

Finalmente, la mejor condición para la obtención de biogás a partir de procesos de biodigestión fue dada por: El estiércol de cerdo (-1), a una temperatura de entrada de 343,15 K (2) y un flujo de biomasa de 46,6175 L/día (-1)

Tabla 14. Propiedades de la corriente de Biogás para la mejor condición en Aspen plus

Propiedad	Unidades	Valor
Temperatura	K	328,15
Presión	N/m ²	101325
Fracción molar de vapor		1
Entalpía molar	J/kmol	-122600574
Entalpía de masa	J/kg	-4210854,22
Entropía molar	J/kmol-K	-34713,76
Entropía de masa	J/kg-K	-1192,28
Densidad molar	kmol/m ³	0,03
Flujo de entalpía	Watt	-33,58
MW promedio		29,11
Flujo molar	kmol/hr	0,0009
Flujo de masa	kg/dia	0,69
Flujo de volumen	l/dia	637,33
LHV	kJ/kg	21782,9

El biogás es utilizado actualmente para producir hidrogeno con esta finalidad se configuro un reactor de Gibbs para la producción de hidrogeno en programa Aspen Plus denominado B4 como lo muestra la figura 32 con el objetivo de evaluar el proceso de reformado catalítico de biogás con la corriente de Biogás de salida.

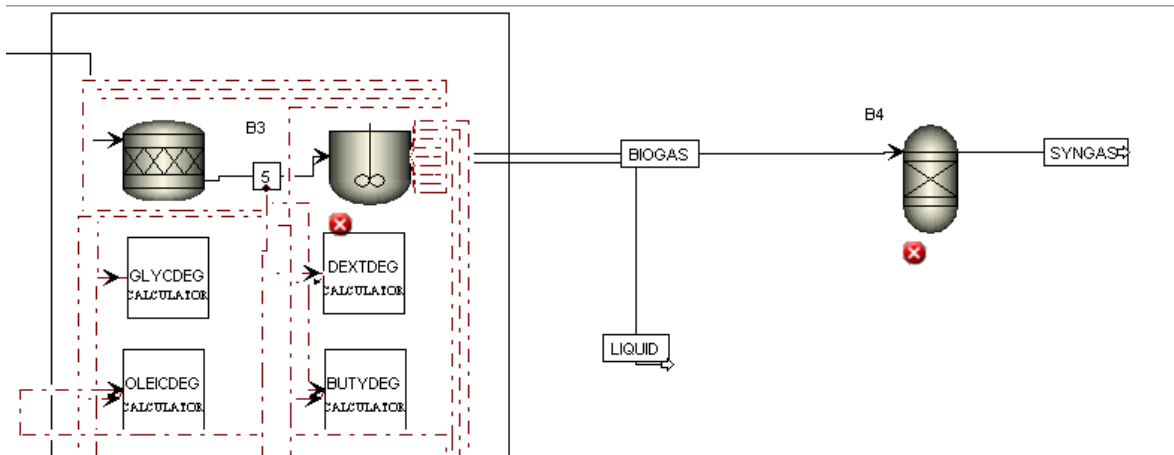


Figura 32. Reactor Ideal de Gibbs configurado para producción de hidrogeno a partir de biogas

Este reactor calcula aleatoriamente las concentraciones de salida de los productos a partir de las posibles reacciones entre los reactivos de entrada. El proceso de reformado puede ser representado por la reacción en la Tabla 15:

Tabla 15. Reacción del reformado catalítico seco

Reaccion	Entalpia de Formacion
$\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \leftrightarrow 2\text{CO} + 2\text{H}_2$	$\Delta_f H_{298}^\circ = 247,3 \text{ KJ/mol}$

La reacción en el reactor fue simulada a 800 °C y una presión de 1 Atm, con los datos de salida de la corriente de biogás, con las siguientes especificaciones de la corriente de salida:

Tabla 16. Propiedades de la corriente SYNGAS.

Propiedad	Unidades	Valor
Temperatura	K	1073,15
Presion	N/m ²	101325
Fraccion molar de vapor		1
Entalpia molar	J/kmol	-20651707,6
Entalpia de masa	J/kg	-1668340,93
Entropia molar	J/kmol-K	79476,41
Entropia de masa	J/kg-K	6420,47
Densidad molar	kmol/m ³	0,01
Flujo de entalpia	Watt	-13,86
MW promedio		12,37
Flujo molar	kmol/hr	0,002
Hidrogeno		0,6
CARBO-01		0,39
Flujo de masa	kg/dia	0,69
Flujo de volumen	l/dia	637,33

La relación molar de H₂/CO en la corriente de salida fue de 1,5 siendo este gas aprovechable para ciclos energéticos y si se somete a purificación, para producción de hidrogeno por síntesis de Fisher Tropsch (Holladay et al., 2009).

8.6. Matriz de correlación

La matriz de correlación se obtuvo a partir de los datos de salida de la corriente de Biogás, mediante STATISTICA para analizar la correlación entre los factores (BT, BF, T) con la composición de salida del Biogás y con los parámetros energéticos de la corriente tal como se muestra en la Tabla 17.

Tabla 17. Matriz de correlación

Matriz de correlación de las variables									
	Factores			Variables de respuesta					
	BT	BF	T	CO ₂	CH ₄	LHV (J/m ³)	G (J/Kmol)	Entalpia	S(J/Kmol ^{OK})
BT	1,00	-0,00	-0,00	0,76	-0,32	-0,9	-0,79	0,94	0,9
BF	-0,00	1,00	0,00	0,00	-0,00	-0,0	-0,00	0,20	0,0
T	-0,00	0,00	1,00	-0,00	0,00	-0,0	0,00	0,23	-0,0
CO ₂	0,76	0,00	-0,00	1,00	-0,86	-0,9	-1,00	0,72	0,9
CH ₄	-0,32	-0,00	0,00	-0,86	1,00	0,6	0,83	-0,30	-0,6
LHV (J/m ³)	-0,94	-0,00	-0,00	-0,93	0,62	1,0	0,95	-0,89	-1,0
G (J/Kmol)	-0,79	-0,00	0,00	-1,00	0,83	0,9	1,00	-0,75	-1,0
Entalpia	0,94	0,20	0,23	0,72	-0,30	-0,9	-0,75	1,00	0,9
S(J/Kmol ^{OK})	0,94	0,00	-0,00	0,94	-0,63	-1,0	-0,95	0,88	1,0

La matriz muestra correlaciones fuertes de la única variable realmente importante del proceso, la Biomasa, en la cual se muestran los datos en rojo como los más representativos, así vemos una correlación de (+0,76) entre el tipo de biomasa y la concentración de CO₂, mostrando que la biomasa con el valor categórico mayor (+1) , el bagazo de caña es la que genera la mayor fracción de CO₂ a la salida, simultáneamente genera la menor concentración de metano , representado en una correlación negativa (-0,32), de igual forma esta biomasa es la que posee el menor poder calorífico , evidenciando una correlación negativa (-0,9), también se puede observar que tiene una correlación negativa en relación a la energía libre de Gibbs (-0,76) esto es esperado ya que podemos observar que entre el poder calorífico y la energía libre de Gibbs hay una correlación positiva (0,95), respecto a la entalpia y entropía esta biomasa tiene correlaciones positivas de (0,94) para la entalpia y (0,9) para la entropía, lo cual conduce a que estas dos variables de respuesta sean opuestas al poder calorífico y la energía libre de Gibbs, con correlaciones negativas las cuales son (-0,89) entre el poder calorífico y la entalpia, (-1,0) entre el poder calorífico y la entropía, (-0,75) entre la energía libre de Gibbs y la entalpia y (-1,0) entre la energía libre de Gibbs y la entropía. Existe una correlación negativa entre el CH₄ y el CO₂ de (-0,86) esto es debido a que si hay más fracción en uno sucede lo contrario en el otro y esto se pudo observar en los gráficos de contorno, CO₂ influye negativamente en el poder calorífico con una correlación de (-0,9) y positivamente

en la entropía con una correlación de (0,9)

9. CONCLUSIONES

- De acuerdo a las simulaciones realizadas con las diferentes variables, el tipo de biomasa, Flujo de biomasa, y la temperatura de entrada, se determinó que todas tuvieron un grado de significancia en los diferentes parámetros evaluados los cuales fueron Metano (CH_4), Dioxido de carbono (CO_2), LHV y energía de Gibbs, pero de acuerdo al análisis ANOVA y el análisis de contornos de las figuras se determinó que la variable que influye en gran medida es el Tipo de biomasa en el que se observan cambios más grandes en los valores a comparación de las otras 2 variables esto señala que se podría generar un modelo empírico para el comportamiento de las variables, solamente en función del tipo de Biomasa.
- El biogas con mayor poder calorífico se obtuvo con la biomasa estiércol de cerdo con un valor promedio de 19346,688 KJ/Kg, con una composición de 0,537 de metano y 0,257 de dioxido de carbono.
- Estadísticamente en futuros estudios se pretende modelar la cinética de reacción y compararla con datos experimentales reales que tengan en cuenta la temperatura de reacción, el tiempo de residencia y el volumen del reactor ya que son variables que pueden modificar la cinética y la termodinámica de las reacciones químicas involucradas en el proceso.
- El biogas obtenido se puede utilizar en procesos de producción de hidrógeno, con la inserción de otras tecnologías de reformado catalítico, obteniendo gas de síntesis con prometedores valores de hidrógeno y CO para aprovechamiento de producción de olefinas y compuestos renovables.

9. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Allegue, L. B., & Hinge, J. (2012). Biogas and bio-syngas upgrading. *Danish Technological Institute, December*.
- Ampuero Seguel, F. A. (2018). *Desarrollo de ingeniería Conceptual Y básica para la implementación de la tecnología de biodigestión en zonas rurales (Tesis pregrado)*. Universidad Técnica Federico Santa María.
- Andrei, A. M., Samuel, N. M. de S., Solles, A. R., Claudinei, de A., Glaucio, J. G., Simoni, S. V., Reginaldo, F. S., & Jair, A. C. S. (2016). Quali-Quantitative study of biogas production from bio-digestion of cutting poultry. *African Journal of Agricultural Research, 11*(37), 3506–3513. <https://doi.org/10.5897/ajar2016.11328>
- Angelidaki, Ellegaard, & Ahring. (1999). A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and Bioengineering, 63* 3, 363–372.
- Angelidaki, I., Treu, L., Tsapekos, P., Luo, G., Campanaro, S., Wenzel, H., & Kougias, P. G. (2018). Biogas upgrading and utilization: Current status and perspectives. In *Biotechnology Advances* (Vol. 36, Issue 2). <https://doi.org/10.1016/j.biotechadv.2018.01.011>
- Aquino Neto, S., Reginatto, V., & De Andrade, A. R. (2018). *Microbial Fuel Cells and Wastewater Treatment* (C. A. Martínez-Huitle, M. A. Rodrigo, & O. B. T.-E. W. and W. T. Scialdone (eds.)). Butterworth-Heinemann. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813160-2.00012-2>
- Batstone, D., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S., Pavlostathis, S., Rozzi, A., Sanders, W., Siegrist, H., & Vavilin, V. (2002). Anaerobic digestion model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology: A Journal of the International Association on Water Pollution Research, 45*, 65–73.
- Bonechi, C., Consumi, M., Donati, A., Leone, G., Magnani, A., Tamasi, G., & Rossi, C. (2017). Biomass: An overview. In F. Dalena, A. Basile, & C. B. T.-B. S. for the F. Rossi (Eds.), *Bioenergy Systems for the Future* (pp. 3–42). Woodhead Publishing. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-08-101031-0.00001-6>
- Capurro Navarro, C. M. (2018). *OPTIMIZACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE METANO A PARTIR DE LOS RESIDUOS CERVECEROS GENERADOS EN LA CERVECERÍA BARRANCO BEER COMPANY (Tesis de pregrado)*. Universidad Científica del Sur.
- Carneiro, R. B., Gonzalez-Gil, L., Londoño, Y. A., Zaiat, M., Carballa, M., & Lema, J. M.

- (2020). Acidogenesis is a key step in the anaerobic biotransformation of organic micropollutants. *Journal of Hazardous Materials*, 389.
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121888>
- Caruana, D. J., & Olsen, A. E. (2012). *Anaerobic Digestion: Processes, Products, and Applications*. Nova Science Publishers.
- Comino, E., Riggio, V. A., & Rosso, M. (2012). Biogas production by anaerobic co-digestion of cattle slurry and cheese whey. *Bioresource Technology*, 114, 46–53.
<https://doi.org/10.1016/J.BIORTECH.2012.02.090>
- Corona Zuñiga, I. (2007). *Biodigestores*.
- Deng, L., Liu, Y., & Wang, W. (2020). *Biogas Technology*. Springer Singapore.
- Diz Cruz, E. (2016). *Estadística básica, introducción a la estadística con R* (Ediciones de la U (ed.); 1st ed.). <https://www.ebooks7-24.com:443/?il=5741>
- Faverín, C., Gratton, R., & Machado, C. F. (2014). Emisiones de gases de efecto invernadero en sistemas de producción de carne vacuna de base pastoril. Revisión bibliográfica. *Revista Argentina de Producción Animal*, 34(1), 33–54.
- Fernandez-Gonzalez, N., Pedizzi, C., Lema, J. M., & Carballa, M. (2019). Air-side ammonia stripping coupled to anaerobic digestion indirectly impacts anaerobic microbiome. *Microbial Biotechnology*, 12(6), 1403–1416.
<https://doi.org/10.1111/1751-7915.13482>
- Ferré, J. (2009). 3.02 - *Regression Diagnostics* (S. D. Brown, R. Tauler, & B. B. T.-C. C. Walczak (eds.); pp. 33–89). Elsevier. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-044452701-1.00076-4>
- Hengeveld, E. J., van Gemert, W. J. T., Bekkering, J., & Broekhuis, A. A. (2014). When does decentralized production of biogas and centralized upgrading and injection into the natural gas grid make sense? *Biomass and Bioenergy*, 67, 363–371.
<https://doi.org/10.1016/J.BIOMBIOE.2014.05.017>
- Holladay, J. D., Hu, J., King, D. L., & Wang, Y. (2009). An overview of hydrogen production technologies. *Catalysis Today*, 139(4), 244–260.
<https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.08.039>
- Juan pablo Rojas Sossa. (2015). *Evaluación de la producción de biogas por medio de la biodigestión anaerobia semicontinua utilizando residuos del beneficiado de cafe como sustrato (tesis de pregrado)*. Universidad de Costa Rica.
- Kavacik, B., & Topaloglu, B. (2010). Biogas production from co-digestion of a mixture of cheese whey and dairy manure. *Biomass and Bioenergy*, 34(9), 1321–1329.

<https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2010.04.006>

- Lamb, J. J. (2020). *Anaerobic Digestion: From Biomass to Biogas*. Scio Publishing.
- Lin, Q., De Vrieze, J., Li, J., & Li, X. (2016). Temperature affects microbial abundance, activity and interactions in anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 209, 228–236. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.02.132>
- Nelson, V., & Starcher, K. (2017). *Introduction to Bioenergy* (C. Press (ed.)).
- Nkodi, T. M., Taba, K. M., Kayembe, S., Mulaji, C., & Mihigo, S. (2016). Biogas Production by Co-Digestion of Cassava Peels with Urea. *International Journal of Scientific Engineering and Technology*, 5(3), 139–141.
- Okoroigwe, E. C., Ibetto, C. N., & Ezema, C. G. (2014). Experimental study of anaerobic digestion of dog waste. *Scientific Research and Essays*, 9(6). <https://doi.org/10.5897/sre2013.5705>
- Ozturk, B. (2012). Evaluation of Biogas Production Yields of Different Waste Materials. *Earth Science Research*, 2(1), 165–174. <https://doi.org/10.5539/esr.v2n1p165>
- Panichnumsin, P., Nopharatana, A., Ahring, B., & Chaiprasert, P. (2010). Production of methane by co-digestion of cassava pulp with various concentrations of pig manure. *Biomass and Bioenergy*, 34(8). <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2010.02.018>
- Pannucharoenwong, N., Rattanadecho, P., Timchenko, V., & Echaroj, S. (2019). INVESTIGATION OF DIFFERENT IMPELLER CONFIGURATION ON ANAEROBIC CO-DIGESTION OF MANURE AND ORGANIC WASTE FOR BIO-METHANE PRODUCTION. 27(3).
- Rajendran, K., Kankanala, H. R., Lundin, M., & Taherzadeh, M. J. (2014). A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus. *Bioresource Technology*, 168. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.01.051>
- Recebli, Z., Selimli, S., Ozkaymak, M., & Gonc, O. (2015). Biogas production from animal manure. *Journal of Engineering Science and Technology*, 10(6). <https://doi.org/10.1016/j.proeps.2015.08.144>
- Sebastián Nogués, F., García-Galindo, D., & Rezeau, A. (2010). *Energía de la biomasa. Volumen II* (Prensas universitarias de Zaragoza (ed.)).
- Siami, S., Aminzadeh, B., Karimi, R., & Hallaji, S. M. (2020). Process optimization and effect of thermal, alkaline, H₂O₂ oxidation and combination pretreatment of sewage sludge on solubilization and anaerobic digestion. *BMC Biotechnology*, 20(1), 1–13. <https://doi.org/10.1186/s12896-020-00614-1>
- Soporte Minntab. (2019). *Tabla de Análisis de varianza de ANOVA de un solo factor*.

<https://support.minitab.com/es-mx/minitab/18/help-and-how-to/modeling-statistics/anova/how-to/one-way-anova/interpret-the-results/all-statistics-and-graphs/analysis-of-variance/>

- Tobon Abello, A. H. (2018). *Analisis De Los Posibles Factores Que Dificultan La Implementacion De Biodigestores Tipo Tubular Y Cupula Flotante En Las Zonas Rurales Y Urbanas De La Region Norte De Colombia (tesis de pregrado)*. Universidad Del Norte.
- Triola, M. (2013). *Estadística* (11th ed.). Pearson Educación.
- Turpeinen, E., Raudaskoski, R., Pongrácz, E., & Keiski, R. L. (2008). Thermodynamic analysis of conversion of alternative hydrocarbon-based feedstocks to hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(22).
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.08.037>
- United Nations, Department of Economic and Social Affairs, P. D. (2017). *World Population Prospects: The 2017 Revision, Key Findings and Advance Tables*.
- UPME. (n.d.). "Atlas" . In *Mar Eng Nav Architect* (Vol. 95, Issue 1155).
- Varnero Moreno, M. T. (2011). *Manual del Biogás*. Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación.
- Vico, A., & Artemio, N. (2017). *Biogas : Production, Applications and Global Developments*. Nova Science Publishers, Inc.
<http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=e000xww&AN=1652552&lang=es&site=ehost-live>
- Wang, G., Dai, X., Zhang, D., He, Q., Dong, B., Li, N., & Ye, N. (2018). Two-phase high solid anaerobic digestion with dewatered sludge: Improved volatile solid degradation and specific methane generation by temperature and pH regulation. *Bioresource Technology*, 259(March), 253–258. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.03.074>
- Wintsche, B., Glaser, K., Sträuber, H., Centler, F., Liebetrau, J., Harms, H., & Kleinsteuber, S. (2016). Trace Elements Induce Predominance among Methanogenic Activity in Anaerobic Digestion. *Frontiers in Microbiology*, 7.
<https://doi.org/10.3389/fmicb.2016.02034>
- Zhang, Z., Zhang, G., Li, W., Li, C., & Xu, G. (2016). Enhanced biogas production from sorghum stem by co-digestion with cow manure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(21). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.02.042>

10. ANEXOS

Anexo 1 Composición del estiércol de cerdo agregada a la corriente INPUT de la simulación

Componente	Valor
AGUA	0,936
GLICEROL	
ACIDO OLEICO	
GLUCOSA	0,0061
ACIDO ACETICO	0
ACIDO PROPANOICO	0
ACIDO ISOBUTIRICO	
ACIDO ISOVALERICO	
H+	
OH-	
AMONIACO	0,0027
NH4+	
DIOXIDO DE CARBONO	
CIANOACETATO DE ETILO	
ARGININA	
HISTIDINA-E-2	
LISINA	
TIROSINA	
TRIPTOFANO	
FENILALANINA	
CISTEINA-E-2	
METIONINA	
TREONINA	
SERINA	
LEUCINA	

ISOLEUCINA	
VALINA	
ACIDO GLUTAMICO	
ACIDO ASPARTICO	
GLICINA	
ALANINA	
PROLINA	
HIDROGENO	
METANO	
INDOLE	
FORMAMIDA	
ACIDO SULFHIDRICO	
METANOTIOL	
BENCENO	
FENOL	
ACIDO CARBONICO	
HCO3-	
CO3--	
HS-	
CELULOSA	0,0088
ACIDO GLUTARICO	0,0131
GLUCOSA	
TRIOLEINA	0,001
TRIPALMITINA	0,001
ALCOHOL CETILICO	
SN-1-PALMITO-2-OLEIN	0
SN-1-PALMITO-2-	
LINOLEIN	0,001
XILOSA	0
FURFURAL	
ACIDO LINOLEICO	
CELULOSA	0

ETANOL	
PROTEINA	0,0092
KERATINA	0,0055
CH3COO-	
INERTE	0,0156

Anexo 2 Composición del estiércol de vaca agregada a la corriente INPUT de la simulación

Componente	Valor
AGUA	0,94
GLICEROL	
ACIDO OLEICO	
GLUCOSA	0,01
ACIDO ACETICO	0
ACIDO PROPANOICO	0
ACIDO ISOBUTIRICO	
ACIDO ISOVALERICO	
H+	
OH-	
AMONIACO	0,001
NH4+	
DIOXIDO DE CARBONO	
CIANOACETATO DE ETILO	
ARGININA	
HISTIDINA-E-2	
LISINA	
TIROSINA	
TRIPTOFANO	
FENILALANINA	
CISTEINA-E-2	
METIONINA	
TREONINA	
SERINA	
LEUCINA	
ISOLEUCINA	
VALINA	
ACIDO GLUTAMICO	

ACIDO ASPARTICO	
GLICINA	
ALANINA	
PROLINA	
HIDROGENO	
METANO	
INDOLE	
FORMAMIDA	
ACIDO SULFHIDRICO	
METANOTIOL	
BENCENO	
FENOL	
ACIDO CARBONICO	
HCO3-	
CO3--	
HS-	
CELULOSA	0,022
ACIDO GLUTARICO	0,01
GLUCOSA	
TRIOLEINA	0,0004
TRIPALMITINA	0,0004
ALCOHOL CETILICO	
SN-1-PALMITO-2-OLEIN	0
SN-1-PALMITO-2-	
LINOLEIN	0,0004
XILOSA	0
FURFURAL	
ACIDO LINOLEICO	
CELULOSA	0
ETANOL	
PROTEINA	0,003
KERATINA	0,0018

CH3COO-

INERTE

0,011

Anexo 3 Composición del bagazo de caña agregada a la corriente INPUT de la simulación

Componente	Valor
AGUA	0,94
GLICEROL	
ACIDO OLEICO	
GLUCOSA	0,0008
ACIDO ACETICO	0
ACIDO PROPANOICO	0
ACIDO ISOBUTIRICO	
ACIDO ISOVALERICO	
H+	
OH-	
AMONIACO	0,0003
NH4+	
DIOXIDO DE CARBONO	
CIANOACETATO DE ETILO	
ARGININA	
HISTIDINA-E-2	
LISINA	
TIROSINA	
TRIPTOFANO	
FENILALANINA	
CISTEINA-E-2	
METIONINA	
TREONINA	
SERINA	
LEUCINA	
ISOLEUCINA	
VALINA	
ACIDO GLUTAMICO	

ACIDO ASPARTICO	
GLICINA	
ALANINA	
PROLINA	
HIDROGENO	
METANO	
INDOLE	
FORMAMIDA	
ACIDO SULFHIDRICO	
METANOTIOL	
BENCENO	
FENOL	
ACIDO CARBONICO	
HCO3-	
CO3--	
HS-	
CELULOSA	0,024
ACIDO GLUTARICO	0,0146
GLUCOSA	
TRIOLEINA	0,00012
TRIPALMITINA	0,00012
ALCOHOL CETILICO	
SN-1-PALMITO-2-OLEIN	0
SN-1-PALMITO-2-	
LINOLEIN	0,00012
XILOSA	0
FURFURAL	
ACIDO LINOLEICO	
CELULOSA	0
ETANOL	
PROTEINA	0,0007
KERATINA	0,0004

CH3COO-

INERTE

0,01884

Anexo 4 Reacciones en la fase de hidrólisis

No.	Compuesto	Reacción de Hidrólisis	Avance de la reacción
1	Almidón	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.6 ± 0.2
2	Celulosa	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.4 ± 0.1
3	Hemicelulosa	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow 2.5 C_2H_4O_2$	0.5 ± 0.2
4	Hemicelulosa	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_5$	0.6 ± 0.0
5	Xilosa	$C_5H_{10}O_5 \rightarrow C_5H_4O_2 + 3 H_2O$	0.6 ± 0.0
6	Celulosa	$C_6H_{12}O_6 + H_2O \rightarrow 2 C_2H_6O + 2 CO_2$	0.4 ± 0.1
7	Etanol	$2 C_2H_6O + CO_2 \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + CH_4$	0.6 ± 0.1
8	Proteína soluble	$C_{13}H_{25}O_7 N_3S + 6 H_2O \rightarrow 6.5 CO_2 + 6.5 CH_4 + 3 H_3N + H_2S$	0.5 ± 0.2
9	Proteína insoluble	$I.P + 0.3337 H_2O \rightarrow 0.045 C_6H_{14}N_4O_2 + 0.048 C_4H_7NO_4 + 0.047 C_4H_9NO_3 + 0.172 C_3H_7NO_3 + 0.074 C_5H_9NO_4 + 0.111 C_5H_9NO_2 + 0.25 C_2H_5NO_2 + 0.047 C_3H_7NO_2 + 0.067 C_3H_6NO_2S + 0.074 C_5H_{11}NO_2 + 0.07 C_6H_{13}NO_2 + 0.046 C_6H_{13}NO_2 + 0.036 C_9H_{11}NO_2$	0.6 ± 0.1
10	Trioleína	$C_{57}H_{104}O_6 + 3 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + 3 C_{18}H_{34}O_2$	0.5 ± 0.2
11	Tripalmato	$C_{51}H_{98}O_6 + 8.436 H_2O \rightarrow 4 C_3H_8O_3 + 2.43 C_{16}H_{34}O$	0.5 ± 0.3
12	Palmito-oleína	$C_{37}H_{70}O_5 + 4.1 H_2O \rightarrow 2.1 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{34}O_2$	0.6 ± 0.2
13	Palmito-linoleína	$C_{37}H_{68}O_5 + 4.3 H_2O \rightarrow 2.2 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{32}O_2$	0.6 ± 0.2

Nota. Recuperado de Rajendran et al; (2014)

Anexo 5 Reacciones para la degradación de aminoácidos, y las fases de acidogenesis, acetogenesis y metanogenesis

No	Compuesto	Reacciones químicas	K (s ⁻¹)
Reacciones de degradación de aminoácidos			
1	Glicina	$C_2H_5NO_2 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
2	Treonina	$C_4H_9NO_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
3	Histidina	$C_6H_8N_3O_2 + 4 H_2O + 0.5 H_2 \rightarrow CH_3NO + C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + 2 H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
4	Arginina	$C_6H_{14}N_4O + 3 H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + 4 H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
5	Prolina	$C_5H_9NO_2 + H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
6	Metionina	$C_5H_{11}NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + CO_2 + H_3N + H_2 + CH_4S$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
7	Serina	$C_3H_7NO_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
8	Treonina	$C_4H_9NO_3 + H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + H_3N + H_2 + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
9	Ácido aspártico	$C_4H_7NO_4 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + 2 CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
10	Ácido glutámico	$C_5H_9NO_4 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
11	Ácido glutámico	$C_5H_9NO_4 + 2 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
12	Histidina	$C_6H_8N_3O_2 + 5 H_2O \rightarrow CH_3NO + 2 C_2H_4O_2 + 2 H_3N + CO_2 + 0.5 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
13	Arginina	$C_6H_{14}N_4O_2 + 6 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + 4 H_3N + 2 CO_2 + 3 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
14	Lisina	$C_6H_{14}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + C_4H_8O_2 + 2 H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
15	Leucina	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
16	Isoleucina	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
17	Valina	$C_5H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_8O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
18	Fenialanina	$C_9H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6 + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
19	Tirosina	$C_9H_{11}NO_3 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6O + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
20	Triptófano	$C_{11}H_{12}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_8H_7N + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
21	Glicina	$C_2H_5NO_2 + 0.5 H_2O \rightarrow 0.75 C_2H_4O_2 + H_3N + 0.5 CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
22	Alanina	$C_3H_7NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
23	Cisteína	$C_3H_6NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 0.5 H_2 + H_2S$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
Reacciones acidógenas			

24	Dextrosa	$C_6H_{12}O_6 + 0.1115 H_3N \rightarrow 0.1115 C_5H_7NO_2 + 0.744 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.4409 C_4H_8O_2 + 0.6909 CO_2 + 1.0254 H_2O$	$9.54 \cdot 10^{-03}$
25	Glicerol	$C_3H_8O_3 + 0.4071 H_3N + 0.0291 CO_2 + 0.0005 H_2 \rightarrow 0.04071 C_5H_7NO_2 + 0.94185 C_3H_6O_2 + 1.09308 H_2O$	$1.01 \cdot 10^{-02}$
Reacciones acetogénicas			
26	Ácido oleico	$C_{18}H_{34}O_2 + 15.2396 H_2O + 0.2501 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.6998 C_2H_4O_2 + 14.4978 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
27	Ácido propiónico	$C_3H_6O_2 + 0.06198 H_3N + 0.314336 H_2O \rightarrow 0.06198 C_5H_7NO_2 + 0.9345 C_2H_4O_2 + 0.660412 CH_4 + 0.160688 CO_2 + 0.00055 H_2$	$1.95 \cdot 10^{-07}$
28	Ácido isobutírico	$C_4H_8O_2 + 0.0653 H_3N + 0.8038 H_2O + 0.0006 H_2 + 0.5543 CO_2 \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 1.8909 C_2H_4O_2 + 0.446 CH_4$	$5.88 \cdot 10^{-06}$
29	Ácido isovalérico	$C_5H_{10}O_2 + 0.0653 H_3N + 0.5543 CO_2 + 0.8044 H_2O \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 0.8912 C_2H_4O_2 + C_3H_6O_2 + 0.4454 CH_4 + 0.0006 H_2$	$3.01 \cdot 10^{-08}$
30	Ácido linoleico	$C_{18}H_{32}O_2 + 15.356 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 9.02 C_2H_4O_2 + 10.0723 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
31	Ácido palmítico	$C_{16}H_{34}O_2 + 15.253 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.4402 C_2H_4O_2 + 14.9748 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
Reacciones metanogénicas			
32	Ácido acético	$C_2H_4O_2 + 0.022 H_3N \rightarrow 0.022 C_5H_7NO_2 + 0.945 CH_4 + 0.066 H_2O + 0.945 CO_2$	$2.39 \cdot 10^{-03}$
33	Hidrógeno	$14.4976 H_2 + 3.8334 CO_2 + 0.0836 H_3N \rightarrow 0.0836 C_5H_7NO_2 + 3.4154 CH_4 + 7.4996 H_2O$	$2.39 \cdot 10^{-03}$

Nota. Recuperado de Rajendran et al; (2014)