



# Modelamiento de Digestión Anaerobia: Modelo Secuencial y Modelo Secuencial con Invasión

**Diego Vicencio M.**

30 de agosto de 2016

# CONTENIDO

- 1 Principios Básicos
- 2 Digestión Anaerobia
- 3 Modelo Simple
  - Escenarios
- 4 Modelo Secuencial
  - Escenarios
- 5 Comparaciones
- 6 Trabajo propuesto
- 7 Referencias

## Quimiostato Simple

- Un Quimiostato Simple es un modelo matemático que describe el comportamiento de biorreactores.
- El modelo consiste en una población en un reactor que tiene una entrada y una salida de líquido, en donde reside una población de microorganismo, que consume el sustrato que ingresa en el líquido.

## Quimiostato Simple

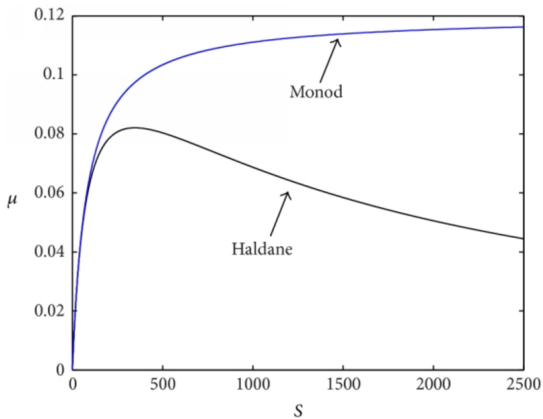
$$\dot{X} = (\mu(S) - D)X$$

$$\dot{S} = -k\mu(S)X + D(S_{In} - S),$$

## Funciones de Crecimiento

- Un aspecto importante en un Quimiostato es la función de crecimiento, que es uno de los factores que determina la estabilidad de los equilibrios.
- Dos funciones que habitualmente se utilizan son:
  - Función Monod: Función de crecimiento monótona creciente acotada superiormente.
  - Función Haldane: Función de crecimiento que tiene un tramo creciente, y otro decreciente.

## Funciones de Crecimiento



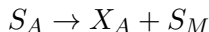
**Figura :** Ejemplos de funciones de crecimiento.

## Digestión Anaerobia

- La digestión anaerobia se ha vuelto un bioproceso ampliamente utilizado en el desarrollo de plantas de tratamiento de aguas, dado que es posible recuperar energía del modelo a partir de la producción de biogas.
- El modelo ADM1 de digestión anaerobia es la más cercana representación del proceso, que es perfecta para usarse como simulación, pero bastante compleja para su análisis matemático.
- Sin embargo, en el caso de agua de desecho, acidogenesis y metanogénesis son considerados los pasos claves de todo el proceso.

## Digestión Anaerobia

- El modelo bioquímico descrito en (Bernard, et al. 2001 [2]) consiste de dos fases, como se mencionó, acidogénica y metanogénica, descrito de forma simplificada:



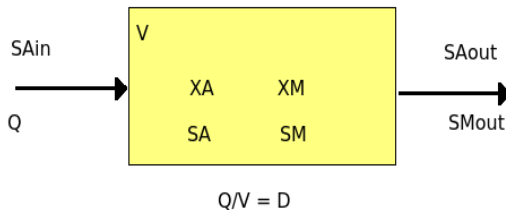
- Es decir, el sustrato de entrada acidogénico  $S_A$  es consumido por el microorganismo correspondiente  $X_A$ , que produce sustrato metanogénico  $S_M$ , que en la segunda fase, es consumido por el organismo metanogénico  $X_M$ , produciendo metano.



## Digestión Anaerobia

- El objetivo de este trabajo es analizar dos diferentes configuraciones para los biorreactores, y comparar sus desempeños, en estado estacionario, en términos de:
  - Criterios de Coexistencia y Estabilidad
  - Capacidad de Descontaminación
  - Producción de Metano
- Basados en el modelo introducido en (Bernard, et al. 2001 [2]), las configuraciones consideradas son:
  - 1 Procesos de acidogenesis y metanogénesis en un solo reactor (Modelo Simple de aquí en adelante).
  - 2 Separación de los tratamientos de acidogénesis y metanogénesis en dos biorreactores conectados secuencialmente (Modelo Secuencial de aquí en adelante).

## Modelo Simple



**Figura :** Esquema de operación para el Modelo Simple

## Modelo Simple

$$\dot{X}_A = \mu_A(S_A)X_A - DX_A$$

$$\dot{S}_A = -k_1\mu_A(S_A)X_A + D(S_{AIn} - S_A)$$

$$\dot{X}_M = \mu_M(S_M)X_M - DX_M$$

$$\dot{S}_M = k_2\mu_A(S_A)X_A - k_3\mu_M(S_M)X_M - DS_M$$

## Modelo Simple

- La función de crecimiento  $\mu_A(\cdot)$  es Monod, y la función de crecimiento  $\mu_M(\cdot)$  es Haldane.
- Esto implica que habrá cuatro posibles equilibrios:
  - Washout global.
  - Washout del microorganismo metanogénico.
  - Equilibrio de coexistencia estable.
  - Equilibrio de coexistencia punto silla.

## Modelo Simple

- Respecto a este modelo se probaron las siguientes propiedades:
  - Es positivamente invariante.
  - Su conjunto  $\omega$ -límite se encuentra restringido dentro de un conjunto compacto.
- Utilizando estas propiedades en conjunto con los resultados relativos al Quimiostato Simple presentes en (Smith H. and Waltman P. 1995 [5]), se estudiaron las propiedades de estabilidad del modelo, y se clasificaron en términos de su estabilidad y factibilidad de sus equilibrios.

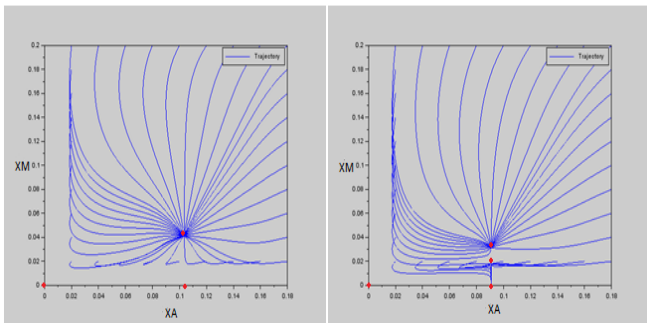
## Escenarios de Washout

- **Escenario I:** Sólo el equilibrio de washout global es factible, y además, es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales no negativas.
- **Escenario II:** Los equilibrios de washout global y de washout del microorganismo metanogénico son factibles, y el último es globalmente asintóticamente estable desde condiciones iniciales distintas de cero para poblaciones.

## Escenarios de Coexistencia

- **Escenario III:** Los equilibrios anteriores son factibles, además de un equilibrio de coexistencia, que es globalmente asintóticamente estable para condiciones iniciales de población positivas.
- **Escenario IV:** Los equilibrios anteriores son factibles, además de un equilibrio adicional de coexistencia, que corresponde a un punto silla. El equilibrio de washout y el equilibrio de coexistencia estable son alcanzables en esta condición.

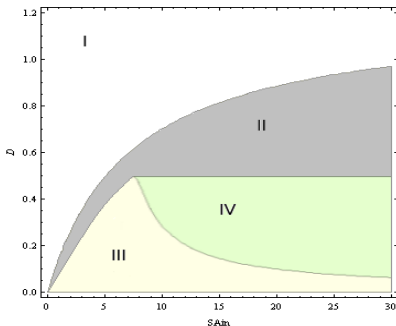
## Escenarios de Coexistencia



**Figura :** Ejemplo de las diferencia entre escenarios III y IV. El diagrama de la izquierda muestra la situación del Escenario III, en cual solo el equilibrio de coexistencia es alcanzable desde cada condición inicial distinta de cero. El gráfico de la derecha muestra la situación del Escenario IV, en el cual el washout del microorganismo metanogénico es alcanzable desde condiciones bajas.



## Escenarios de Coexistencia

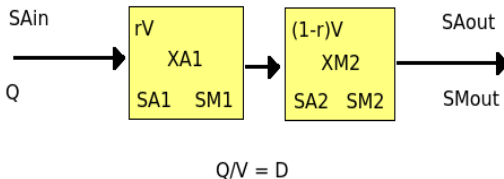


**Figura :** Resumen con todos los escenarios. Las zonas en blanco corresponden al Escenario I. Las zonas en gris, corresponden al Escenario II. Las zonas en amarillo, corresponden al Escenario III, y las zonas en verde, al Escenario IV

## Modelo Secuencial

- La configuración alternativa considerada es la separación de los tratamientos de acidogénesis y metanogénesis en dos biorreactores conectados secuencialmente, en el cual ambos microorganismos están en diferentes reactores y aislados uno del otro.
- La configuración presentada fue inspirada por el trabajo presente en (Haidar et al. 2011 [3]).

## Modelo Simple



**Figura :** Esquema de operación para el Modelo Secuencial

## Modelo Secuencial

$$\dot{X}_{A1} = \mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}X_{A1}$$

$$\dot{S}_{A1} = -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + \frac{D}{r}(S_{A1n} - S_{A1})$$

$$\dot{S}_{A2} = \frac{D}{1-r}(S_{A1} - S_{A2})$$

$$\dot{X}_{M2} = \mu_M(S_M)X_M - \frac{D}{1-r}X_M$$

$$\dot{S}_{M1} = k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}S_{M1}$$

$$\dot{S}_{M2} = -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + \frac{D}{1-r}(S_{M1} - S_{M2})$$

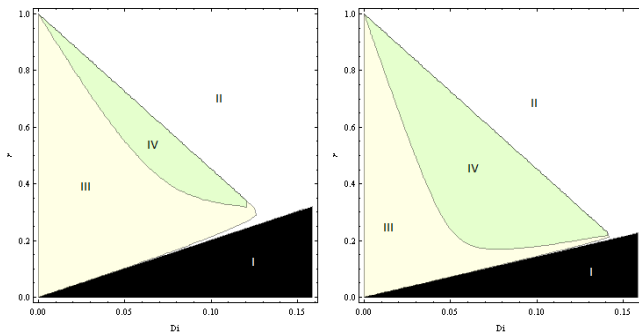
## Modelo Secuencial

- De la misma forma que el Modelo Simple, este modelo cumple con las siguientes propiedades:
  - Es positivamente invariante.
  - Su conjunto  $\omega$ -límite se encuentra restringido dentro de un conjunto compacto.
- Nótese que en este modelo para las diluciones en los reactores se utilizan dos variables. La variable  $D$  correspondiente al cociente entre el caudal y el volumen de líquido total de los reactores, y la variable  $r \in [0, 1]$ , que representa la fracción de volumen de líquido que ocupa cada reactor. ( $rV$  para el primer reactor,  $(1 - r)V$  para el segundo).

## Escenarios

- El Modelo Secuencial tiene los mismos escenarios que el Modelo Simple, es decir, presenta dos escenarios donde ocurre el washout de algún microorganismo (escenarios I y II), y dos escenarios de coexistencia con distintas condiciones de estabilidad (III y IV)
- Además, las condiciones de estabilidad global se mantienen idénticas a las vistas en el Modelo Simple.

# Escenarios



**Figura :** Áreas correspondientes en el plano ( $D$ ,  $r$ ) a escenarios en el Modelo Secuencial, con  $S_{AIn}$  fijo. El área en negro corresponde al Escenario I. El área en blanco corresponde al Escenario II. El área amarilla corresponde al Escenario III, coexistencia en condiciones seguras. El área verde corresponde a Escenario IV, coexistencia con riesgo de washout de microorganismo metanogénico. La condición en el diagrama de la izquierda es  $S_{AIn} = 5(g/l)$ , en la derecha es  $S_{AIn} = 10(g/l)$ . Puede verse que mientras mayor el valor de  $S_{AIn}$ , más área es cubierta por la correspondiente al Escenario IV.

## Resultados obtenidos

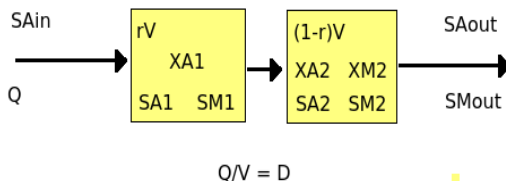
- 1 El Modelo Simple soporta un mayor rango de tasas de dilución tanto para coexistencia como para zonas de estabilidad global del equilibrio de coexistencia.
- 2 El Modelo Simple es mejor desde un punto de vista de descontaminación para tasas de dilución iguales en ambos modelos.
- 3 El Modelo Secuencial es mejor desde el punto de vista de producción de metano.
- 4 Si en ambos sistemas se plantea una estrategia de producción óptima de metano, el Modelo Secuencial puede mejorar la descontaminación del Modelo Simple, mediante una estrategia de elegir valores de dilución y ratios de volumen apropiados para ambos reactores.
- 5 Si la producción de metano es restringida al Escenario III, el patrón se repite: existe un zona del plano ( $D, r$ ) donde hay una mejora sobre el mejor valor obtenido por el Modelo Simple. Esta zona se reduce a medida que  $S_{AIn}$  crece.



## Propuesta

- Entre las preguntas que quedaron abiertas en el trabajo, se plantean:
  - Permitir la invasión de microorganismo acidogénico al segundo reactor.
  - Estudiar otras posibles configuraciones de reactores.

## Propuesta



**Figura :** Modelo Secuencial modificado

## Propuesta

$$\dot{X}_{A1} = \mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}X_{A1}$$

$$\dot{X}_{A2} = \mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(X_{A1} - X_{A2})$$

$$\dot{S}_{A1} = -k_1\mu_A(S_{A1})X_{A1} + \frac{D}{r}(S_{AIn} - S_{A1})$$

$$\dot{S}_{A2} = -k_1\mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(S_{A1} - S_{A2})$$

$$\dot{X}_{M2} = \mu_M(S_{M2})X_{M2} - \frac{D}{1-r}X_{M2}$$

$$\dot{S}_{M1} = k_2\mu_A(S_{A1})X_{A1} - \frac{D}{r}S_{M1}$$

$$\dot{S}_{M2} = -k_3\mu_M(S_{M2})X_{M2} + k_2\mu_A(S_{A2})X_{A2} + \frac{D}{1-r}(S_{M1} - S_{M2})$$

## Objetivos de investigación

Los objetivos de investigación que se plantean son:

- Llevar a cabo un modelamiento computacional del Modelo Secuencial Modificado.
- Investigar de forma cualitativa dicho modelo en términos de descontaminación, producción de metano y condiciones de coexistencia y estabilidad.
- Investigar otras posibles modificaciones y extensiones al modelo.

## Referencias



Batstone D., Keller J. Newell B. Newland M. 1997 *Model development and full scale validation for anaerobic treatment of protein and fat based wastewater*. Water Sci Technol. 36, 423-431



Bernard O., Hadj-Zadok Z., Dochain D. 2001 *Dynamical Model Development and Parameter Identification for an Anaerobic Wastewater Treatment Process*. Biotechnology and Bioengineering 75 (4) , 425-438



Haidar I., Rapaport A., Gérard F. 2011 *Effects of spatial structure and diffusion on the performances of the chemostat. (English summary)* Math. Biosci. Eng. 8 (4), 953-971



Sbarciog, M., Loccufer, M., Noldus, E. 2010 *Determination of appropriate operating strategies for anaerobic digestion systems*. Biochemical Engineering Journal 51(2010), 180-188



Smith H. and Waltman P. 1995 *The theory of chemostat, dynamics of microbial competition*, Cambridge Studies in Mathematical Biology, Cambridge University Press