

Propuesta de un modelo y simulación de procesos de digestión anaerobia como agentes de motivación y de aprendizaje en Laboratorios Virtuales

immediate

ABSTRACT

El empleo de los laboratorios virtuales, dentro del campo de las ingenierías, permite desarrollar el conocimiento aprendido en sesiones teóricas con una mayor flexibilidad de uso y con bajos costes. El estudio de los procesos de digestión anaerobia a través de simulaciones en laboratorios virtuales como complemento a las clases teóricas, hace posible que los estudiantes puedan entender, de una forma pedagógica, como la materia orgánica puede ser degradada por la acción de unos microorganismos en un ambiente carente de oxígeno. En este trabajo se presenta un modelo y una metodología de cálculo para ser aplicada través del software FreeFem++ & Freefem-cs, con el objetivo final de poder simular como funciona la digestión anaerobia dentro de digestores tipo batch de carga parcial y mezcla discontinua. Se pretende crear una propuesta de innovación educativa proporcionando una herramienta para la mejora del conocimiento que tiene que ver con la dinámica de fluido computacional y los procesos bioquímico de digestión anaerobia. Y de forma transversal, se pretende ampliar los conocimientos en el lenguaje de programación y en simulación. El objetivo de esta propuesta es ser utilizado en las actividades formativas prácticas a desarrollar por el estudiante en el contexto de alguna asignatura de los grados y másteres universitarios con competencia en el área de tecnologías medioambientales.

Keywords: Laboratorios virtuales, Digestión anaerobia, FreeFem++ & FreeFem-cs, Biorreactores mezclas heterogénea

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

La resolución de los diversos problemas de la ingeniería lleva asociado un conjunto considerable de conceptos, fenómenos, propiedades y parámetros de diversa complejidad, que en la mayoría de los casos implica un elevado grado de abstracción. Tradicionalmente los procesos de enseñanza-aprendizaje en las titulaciones de ingenierías se han fundamentado a través de sesiones teóricas y prácticas. Las prácticas se plantean desde dos puntos de vista; propuesta y resolución de problemas, y prácticas en laboratorios. Estas últimas, suelen ser realizadas con equipos comerciales, normalmente, con costes elevados tanto en adquisición como en mantenimiento que a veces, no pueden ser asumidos con los recursos o dotaciones económicas disponibles en los laboratorios docentes. Los laboratorios virtuales (LV) son sistemas computacionales, accesibles vía Internet, donde es posible simular un laboratorio convencional y cuya utilidad se ve justificada, entre otros, debido a lo siguiente;

- Su uso por un amplio número de estudiaste sin coincidir en el espacio ni en el tiempo.
- Ventajas económica en cuanto costes.
- La posibilidad experimentar de manera atrevida sin miedo a sufrir o provocar accidente.
- A diferencia de los laboratorios convencionales, que no disponen de suficiente claridad gráficas, estos ofrecen una visión mucho más intuitiva.

El uso de los LV para el estudio de los procesos de Digestión Anaerobia (DA) provee, al estudiante, de una rica experiencia, familiarizándose con los fenómenos relacionados con dichos procesos. Además ofrece la posibilidad de contrastar hipótesis y de investigar por medio del conocimiento conceptual y procedimental relacionados con la metodología científica.

1.2 Objetivos

El objeto de este trabajo es presentar un modelo y una metodología de cálculo para biorreactores con mezclas discontinua tipo Batch, por lotes, donde se desarrollan procesos de DA, y donde gracias a la implementación de un algoritmo pueda ser posible realizar simulaciones numéricas de los diferentes fenómenos relacionado con dichos procesos. Todo ello está orientado para que a través de su puesta en práctica, en los LV, sirva de estrategia de aprendizaje significativa, que ayuden a los estudiantes de las titulaciones de grado y máster en el ámbito de la ingenierías, en el área de tecnología ambiental y sostenibilidad, en el aprendizaje y comprensión de las relaciones existente entre variables y parámetros relacionados con los procesos de DA.

Mediante del uso de la herramienta computacional, de cálculo y simulación, incluidas en el software de libre acceso FreeFem++ & FreeFem-cs,¹ es posible abordar este tipo de problemas, de una forma relativamente sencilla, a partir de la definición de sus ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, siendo, prácticamente, imposible de resolver por cualquier método analítico.

Teniendo en cuenta el propósito educativo de la propuesta, para el diseño del modelo se ha utilizado la descripción de de la materia orgánica y de la biomasa en su formas más simple. A través del uso de la herramienta computacional, de cálculo y simulación, incluidas en el software de libre acceso FreeFem++ & FreeFem-cs,¹ es posible abordar este tipo de problemas, de una forma relativamente sencilla, a partir de la definición de sus ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, siendo, prácticamente, imposible de resolver por cualquier método analítico.

1.3 Contribución de la mejora de competencias, conocimiento y capacidad

Este trabajo se desarrolla dentro de los Proyectos de Innovación Educativa para la Formación Interdisciplinar (PIEFI)- Línea 3. Contenidos y programas de formación y en el seno del Proyecto de Innovación Educativa "Laboratorios como entornos de trabajo para el aprendizaje activo y colaborativo mediante el diseño, desarrollo, construcción, utilización y el rediseño de equipos y dispositivos para su aplicación en las prácticas (PIE 2022-60)" de la ULPGC. Todo ello está orientado a las enseñanzas superiores de Master en Tecnologías Industriales y Grados en Ingenierías, en especial Ingeniería Química e Ingeniería Química Industrial (Figura 1).



Figure 1. Marco de la propuesta

Las descripción competencias asociadas a la herramienta propuesta son las siguientes:

1. Conocimientos básicos y aplicación de tecnologías medioambientales y sostenibilidad.
2. Realizar el diseño y gestión de procedimientos de experimentación para el modelado de fenómenos y sistemas en el ámbito de la ingeniería química.
3. Realizar el diseño y gestión de procedimientos de experimentación para estudiar la cinética de las reacciones químicas y reactores.

4. Capacidad para diseñar, gestionar y operar procedimientos de simulación, control e instrumentación de procesos químicos.

2. MODELO

2.1 Características operacionales

Para la descripción del modelo en 2D ha sido considerado un biodigestor, de sección rectangular (ver Figura 2) tipo batch o por lotes, en el que tanto el sustrato como la biomasa se encuentran sin mezclar. Debido a la complejidad de los procesos biocinéticos reales y las limitaciones matemáticas para poder describir la actividad anaerobia, y teniendo en cuenta la finalidad que se le va a dar al estudio, se ha considerado un modelo sencillo con capacidad de poder predecir la producción de biogás. La cinética de crecimiento de los microorganismos ha sido contemplada en el modelo a fin de poder determinar la naturaleza dinámica de los procesos de DA. Su actividad y, consecuentemente, la producción de biogás puede ser analizada con el modelo, planteando una serie de condiciones iniciales y de fronteras; caudal de entrada, características de sustratos y microorganismos (concentraciones, parámetros cinéticos etc.).

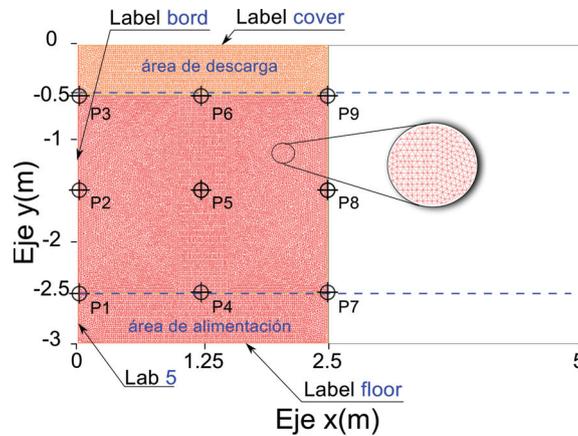


Figure 2. Representación esquemática del biodigestor donde se ha utilizado la mitad de la geometría y de su topología para el cálculo. El mallado resultante está formado por 36642 triángulos y 18202 vértices.

2.2 Ecuaciones gobernantes

2.2.1 En el momento que se efectúa la alimentación del reactor

En este periodo, el movimiento del fluido dentro del reactor responde a los fenómenos advectivos y difusivo, en el que matemáticamente quedan descrito a través de la **ecuación advección-difusión(AD)**.² Como se ha considerado que esta fase transcurre de forma muy rápida, es por ello por lo que no tiene lugar reacciones bioquímicas en dicho periodo. Las ecuaciones gobernantes, formulación fuerte, y las condiciones de contornos considerada son las siguientes,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \phi}{\partial t} - \mathcal{D} \Delta \phi + \vec{u} \nabla \phi &= F(x, y) \text{ para } x, y \in \Omega \\
 \phi(x, y, t) &= g_D(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial \Omega, t > 0 \\
 \frac{\partial \phi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial \Omega, t > 0
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

donde (ϕ) es un valor escalar que representa las concentraciones tanto de sustrato como de microorganismos; $\vec{u} = (u_1, u_2)$ viene dado por la ecuación de Stokes en estado estacionario (2); Γ_D y Γ_N son las condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann respectivamente, $F(x, y)$ Es una función que representa el término fuente, que en este caso tiene el valor igual a cero (0)

La Ecuación de Stokes ha sido empleada para la describir el movimiento del fluido durante esta etapa de alimentación.

El modelo planteado considera un fluido newtoniano con densidad y viscosidad constante.^{3,4} La formulación fuerte y las condiciones de contorno de Dirichlet Γ_D and Γ_N se representa a continuación;

$$\begin{aligned} -\nu\Delta\vec{u} + \nabla p &= \vec{F} \text{ para } x, y \in \Omega \\ \nabla\vec{u} &= 0 \text{ para } x, y \in \Omega \\ \vec{u} &= \vec{u}_0 \text{ para } x, y \in \Gamma_D \\ \nabla\vec{u} \cdot n + pn &= g \text{ para } x, y \in \Gamma_N \end{aligned} \quad (2)$$

donde \vec{u} es la velocidad del fluido p es la presión, y Γ_D , Γ_N son las condiciones de contorno de Dirichlet y Neumann. En este caso las condiciones de Dirichlet vienen definido en la frontera inferior, Label floor (ver Figura 2) con velocidad constante y sentido ascendente.

2.2.2 Durante el tiempo de retención

Ecuación Difusión-Reacción (DR). Se trata de una solución numérica universalmente utilizada dentro de los modelos matemáticos para describir los fenómenos físicos, bioquímicos y fisicoquímicos.⁵ Las ecuaciones gobernantes, formulaciones fuertes, y las condiciones de contorno son las que se definen seguidamente.⁶⁻⁸ ;

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial t} - \mathfrak{D}\Delta\phi + f(\phi) &= F(x, y) \text{ para } x, y \in \Omega \\ \phi(x, y, t) &= g_D(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_D \subset \partial\Omega, t > 0 \\ \frac{\partial\phi(x, y, t)}{\partial n} n(x, y) &= g_N(x, y) \text{ para } x, y \in \Gamma_N \subset \partial\Omega, t > 0 \end{aligned} \quad (3)$$

donde (ϕ) son escalares que pueden representar tanto las concentraciones de sustratos como de células $f(\phi)$ es la función fuente; siendo positivo $f(\phi) > 0$ para el crecimiento y negativo $f(\phi) < 0$ para la muerte del microorganismo y consumición de sustrato. Este término se calcula con las formulaciones planteadas a partir de la cinética del crecimiento (Ecuación 4).

Modelo de digestión anaerobia A pesar de que los procesos de DA han sido modelados por una gran cantidad de autores, el propósito didáctico del modelo justifica que se haya seleccionado aquellos que plantean modelos mucho más simples, , que consideran componentes básicos de la materia orgánica, glucosa, y donde la colonia bacteriana es tratada en su conjunto. Para ellos se ha usado distintas propuestas recogidas de diversas publicaciones.

Metabolismo microbiano El crecimiento bacteriano ha sido modelado a partir de las ecuaciones de crecimiento de Monod (μ ; tasa de crecimiento específica, Eq. 4), quedando excluido los fenómenos inhibitorios. La relación existente entre el crecimiento bacteriano y las concentraciones de sustratos puede ser representada, a partir de modelos experimentales, tal como se expresa en las Ecuaciones 4.^{9,10}

$$f(S_i) = -\frac{\partial S_i}{\partial t} = -\mu \frac{X_i}{Y_i} ; f(X_i) = \frac{\partial X_i}{\partial t} = \mu X_i - K_d X_i \quad \mu = \mu_{max_i} \frac{S_i}{K_{s_i} + S_i}; \quad (4)$$

donde S_i ($kg \text{ DQO } m^{-3}$) es la concentración de sustrato, X_i ($kg \text{ DQO } m^{-3}$) es la concentración de biomasa, μ (d^{-1}), es la constante de monod, velocidad específica,¹⁰ μ_{max_i} (d^{-1}) es la tasa máxima de crecimiento de un determinado microorganismo, Y_1 es un coeficiente de rendimiento del sustrato, K_d (d^{-1}) es la tasa de lisis del microorganismo, and K_{S_1} ($kg \text{ DQO } m^{-3}$) es la constante de saturación del sustrato.

Para la síntesis de nuevo material ($C_5H_7NO_2$) a partir de la glucosa ($C_6H_{12}O_6$), se ha utilizado la siguiente ecuación estequiométrica:¹¹

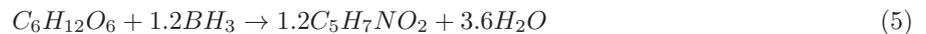


Table 1. Parámetros físicos y cinéticos, T.R. es el tiempo de retención, $S_{i_{ent}}$ y $X_{i_{ent}}$ son las condiciones de contorno para el sustrato y microorganismo respectivamente, y * indica que se trata de kg de DQO.

| Q (m^3/d^{-1}) | T.R. d | \mathcal{D} | $S_{i_{ent}}$ $kg^* \cdot m^{-3}$ | $X_{i_{ent}}$ $kg^* \cdot m^{-3}$ | K_d d^{-1} | K_s $kg^* \cdot m^{-3}$ | α d^{-1} |
|-----------------------|-----------|---------------|--------------------------------------|--------------------------------------|-------------------|------------------------------|----------------------|
| 30 | 1 | $8.64e^{-3}$ | 1 | 100 | 0.9 | 0.0333 | 1 |

Producción de biogás Finalmente, para la simulación de los procesos de producción de biogás, se ha considerado las recomendaciones de varios autores,^{12,13} que plantean valores teóricos del potencial de formación de biogás. Cabe destacar la hipótesis de Basergas¹⁴ que propone que se puede obtener $0.79 m^3$ de biogás por kg de materia orgánica, a partir de la descomposición de carbohidratos.

2.3 Aplicación de FreeFem++ & FreeFem-cs como herramienta de cálculo

El cálculo fue llevado a cabo mediante el software de libre acceso FreeFem++ & FreeFem-cs (Fig??). Se trata de un lenguaje de programación para el cálculo de ecuaciones diferenciales en derivada parciales usando del método de los elementos finitos.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A partir del modelo planteado y metodología de resolución, y con la geometría definida y la información descrita en la tabla 1, se llevó a cabo las simulaciones para un biodigestor tipo batch con mezcla no homogénea, tal como queda reflejada en las Figuras 3, donde se visualiza la distribución del sustrato (Si) y el comportamiento de la biomasa (Xi) para precisos instantes; tercero, octavo y veinteavo día.

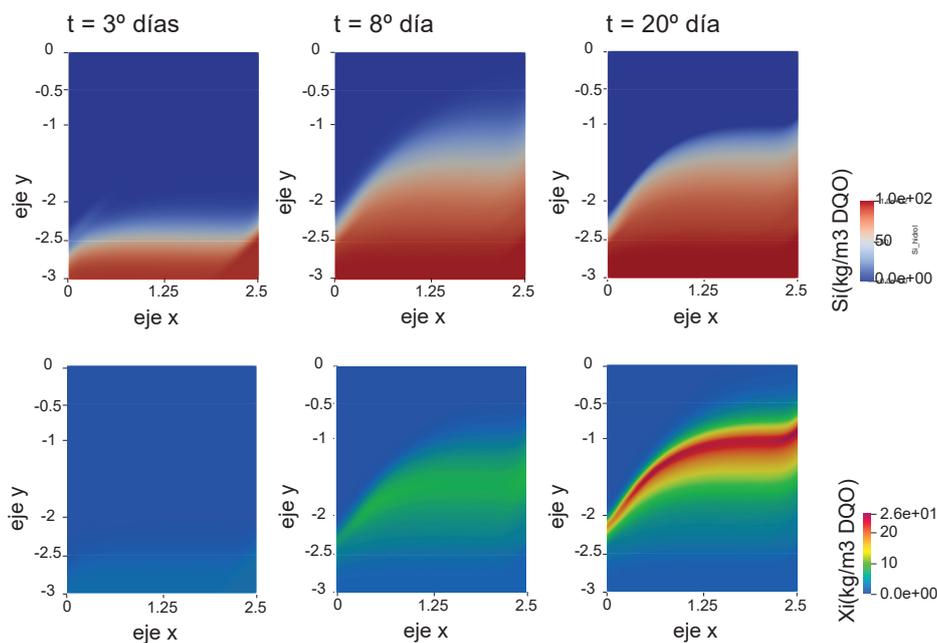


Figure 3. Substrate (up) and cells (down) at time 3,8 and 20 days.

En esta misma imagen (Figura 3) se manifiesta el vínculo existente entre las concentración de sustrato y la abundancia de la colonia microbiana. Ésta última se incrementa en aquellas zonas donde existe mayor cantidad de alimento, y a medida que este es consumido, se produce el efecto contrario. Por otro lado, el efecto de carga o alimentación del biodigestor se ve también reflejado en los tres momentos elegidos. En este caso se produce un movimiento ascendente de todo el líquido con la consiguiente aportación de nuevo material y el empuje de

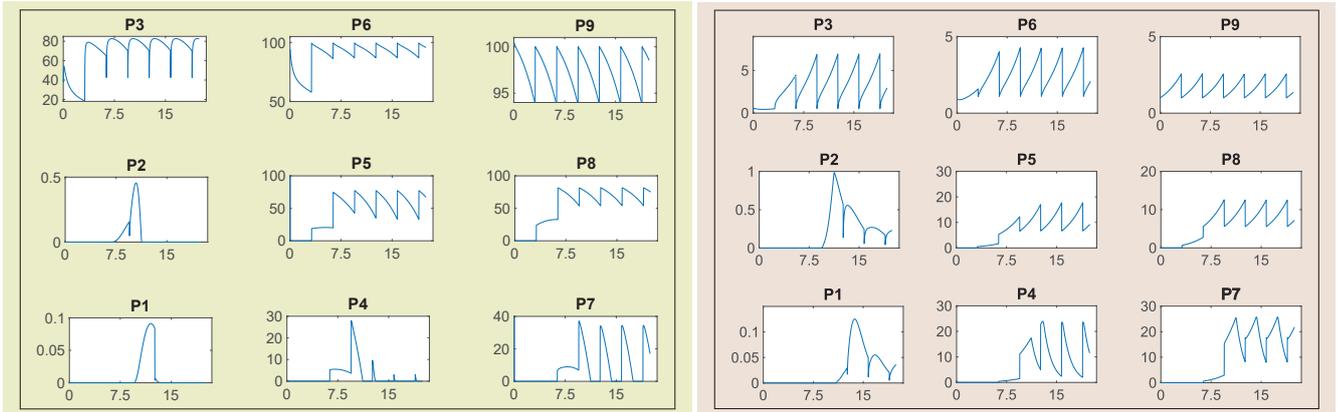


Figure 4. Representación del evolutivo; concentraciones de sustrato (izda.) y microorganismos (dcha.) a lo largo del tiempo, para los puntos 1-3 tomados de la Figura (2). En el eje de abscisa (y) está representado las concentraciones en $\text{kg}(\text{DQO})/\text{m}^3$, y en el de ordenadas el tiempo en días

las concentraciones que ya se encontraban dentro del reactor. Con todo ello resulta que la mayor actividad microbiana se concentra en la zona intermedia que con la aportación diaria, se mantiene el estado estacionario en dicha zona.

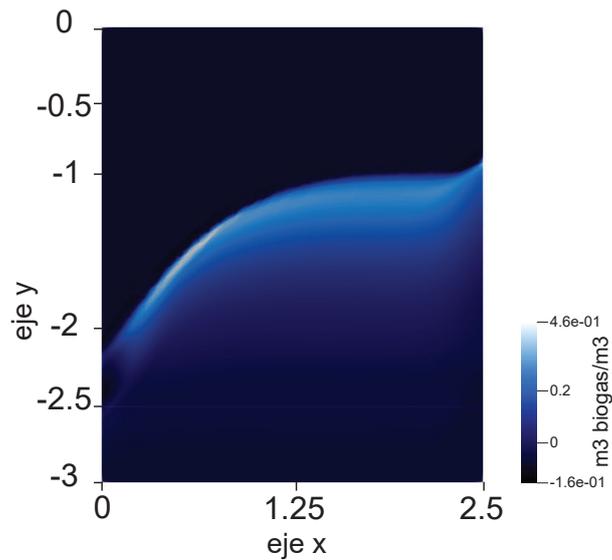


Figure 5. Distribution of the biogás forming (L per m^3) within the reactor

La Figura 3 muestra la evolución de las concentraciones de sustrato y microorganismos a lo largo del tiempo para los 9 puntos seleccionados (P1-P9. ver Figura 2). Aquí puede observarse que las gráficas se ajustan modelo tipo [15] para procesos anaerobios con carga discontinua. En los puntos intermedios se aprecia como existe un pequeño espacio de tiempo, periodo inicial, en el que el aporte de material llegará, pasado un tiempo, a través de las diversas alimentaciones que se producirá diariamente en el reactor. Una vez se disponga de las distintas concentraciones, el sustrato es consumido y los microorganismos tiende a multiplicarse. Una vez alcanzado un determinado valor, estos últimos tenderán a disminuir hasta el momento en que el movimiento de advección del fluido aporte nuevas concentraciones en ese lugar, volviéndose a repetir la misma secuencia. La evolución de ambas gráficas nos indica de forma razonable la relación existente entre las colonias de microorganismos con el sustrato.

En la Figura 5 se observa la distribución del potencial de formación de biogás en m^3 de biogás por m^3 de disolución. La simulación nos indica que existe valores altos en aquellas regiones donde los indicadores de la actividad biológica son mayores, es decir en las zonas intermedias, y del mismo modo los valores más bajos se produce en zonas con menor actividad.

4. CONCLUSIÓN

En este artículo presenta un modelo, y una metodología de cálculo y simulación de los procesos de DA para biodigestores tipo batch con carga discontinua. A partir de los modelos de Stokes, advección-difusión y difusión-reacción, además de la cinética de Monod para describir el comportamiento de los microorganismos anaerobios, se definió una metodología en el que, debido al carácter educacional del estudio, fue considerado aspectos básicos de este proceso. Con la ayuda del lenguaje de programación FreeFem++ & FreeFem-cs, para el cálculo de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales a través del método de los elementos finitos, fue posible plantear un algoritmo donde pudiera describirse y simularse el proceso de remoción de sustrato, el crecimiento y muerte de la biomasa, y formación del producto en forma de biogás.

A partir de los resultados de esta propuesta innovadora, se plantea el modelo y la metodología de manera que pueda ser incluida dentro de la comunidad educacional, en el que los estudiantes puedan participar de forma activa/interactiva dentro los LV, formando parte, así, de una actividad más en el proceso de entrenamiento para el aprendizaje dentro del entorno de las Ingenierías. Con el uso de esta herramienta el estudiante adquirirá las habilidades siguientes;

1. posibilidad de elaboración de diseños experimentales para la solución de los problemas que se le planteen dentro del campo de la investigación en digestión anaeróbica.
2. disponer de las capacidades y destrezas mínimas para el diseño e implementación de modelos de digestión anaeróbica, adaptándola a diversos parámetros de modelización válidas para tareas experimentales de investigación y desarrollo en el ámbito de las tecnologías del medio ambiente.

El hecho de que se haya empleado software de libre acceso, FreeFem++ & FreeFem-cs, facilita que los estudiantes puedan acceder al código y adaptarlo a las diferentes situaciones que se les pudiera presentar, con el fin de poder ampliar la experimentación con el uso de los LV. Todo ello le ofrece un extra al estudiante puesto que la ayuda a ampliar el aprendizaje transversal como es el caso de la programación.

4.1 Agradecimientos

Este proyecto ha sido cofinanciado por la Cooperación Interreg V-A España-Portugal. Programa MAC (Madeira-Azores-Canarias) Proyecto MITIMAC MAC2/1.1a/263.

Este proyecto ha sido financiado en parte por los fondos europeos Next Generation EU (NGEU) bajo el "Real Decreto 641/2021, de 27 de julio, por el que se regula la concesión directa de subvenciones a universidades públicas españolas para la modernización y digitalización del sistema universitario español en el marco del plan de recuperación, transformación y resiliencia (UNIDIGITAL) - Proyectos de Innovación Educativa para la Formación Interdisciplinar (PIEFI) - Línea 3. Contenidos y programas de formación" en el seno del Proyecto de Innovación Educativa "Laboratorios como entornos de trabajo para el aprendizaje activo y colaborativo mediante el diseño, desarrollo, construcción, utilización y el rediseño de equipos y dispositivos para su aplicación en las prácticas" (PIE 2022-60)".

Este proyecto ha sido financiado en parte por the The Next Generation EU (NGEU) fund under "Real Decreto 641/2021. de 27 de julio. por el que se regula la concesión directa de subvenciones a universidades públicas españolas para la modernización y digitalización del sistema universitario español en el marco del plan de recuperación. transformación y resiliencia (UNIDIGITAL) - Proyectos de Innovación Educativa para la Formación Interdisciplinar (PIEFI) - Línea 3. Contenidos y programas de formación" in the scope of the Teaching Innovation Project "Aplicación de técnicas de aprendizaje autónomo y colaborativo para la mejora de los resultados del aprendizaje en entornos de simulación virtual en el ámbito de la ingeniería (PIE 2021 -60)".

REFERENCES

- [1] Hecht, F., “New development in freefem++,” *Journal of Numerical Mathematics* **20**(3-4), 251–266 (2012).
- [2] Khalifa, M., “Some analytical solutions for the advection–dispersion equation,” *Applied Mathematics and Computation* **139**(2), 299–310 (2003).
- [3] Song, L., Li, P.-W., Gu, Y., and Fan, C.-M., “Generalized finite difference method for solving stationary 2d and 3d stokes equations with a mixed boundary condition,” *Comput. Math. Appl.* **80**(6), 1726 – 1743 (2020).
- [4] Ukai, S., “A solution formula for the stokes equation in rn+,” *Commun. Pur. Appl. Math.* **40**(5), 611–621 (1987).
- [5] Balsa-Canto, E., López-Núñez, A., and Vázquez, C., “Numerical methods for a nonlinear reaction–diffusion system modelling a batch culture of biofilm,” *Applied Mathematical Modelling* **41**, 164–179 (2017).
- [6] Singh, S., Bansal, D., Kaur, G., and Sircar, S., “Implicit-explicit-compact methods for advection diffusion reaction equations,” *Comput. Fluids* **212**, 104709 (2020).
- [7] Brito-Espino, S., Ramos-Martín, A., Pérez-Báez, S., and Mendieta-Pino, C., “Application of a mathematical model to predict simultaneous reactions in anaerobic plug-flow reactors as a primary treatment for constructed wetlands,” *Sci. Total Environ.* **713**, 136244 (2020).
- [8] Bozkurt, S., Moreno, L., and Neretnieks, I., “Long-term processes in waste deposits,” *Sci. Total Environ.* **250**(1), 101 – 121 (2000).
- [9] Muloiwa, M., Nyende-Byakika, S., and Dinka, M., “Comparison of unstructured kinetic bacterial growth models,” *South African Journal of Chemical Engineering* **33**, 141–150 (2020).
- [10] Monod, J., “The growth of bacterial cultures,” *Annu. Rev. Microbiol.* **3**(1), 371–394 (1949).
- [11] Kythreotou, N., Florides, G., and Tassou, S. A., “A review of simple to scientific models for anaerobic digestion,” *Renewable Energy* **71**, 701–714 (2014).
- [12] Li, Y., Zhang, R., Liu, G., Chen, C., He, Y., and Liu, X., “Comparison of methane production potential, biodegradability, and kinetics of different organic substrates,” *Bioresource Technology* **149**, 565–569 (2013).
- [13] Buswell, A. M. and Mueller, H. F., “Mechanism of methane fermentation,” *Ind. Eng. Chem.* **44**, 550–552 (Mar. 1952).
- [14] Baserga, U., [*Landwirtschaftliche Co-Vergärungs-Biogasanlagen: Biogas aus organischen Reststoffen und Energiegras*], Eidgenössische Forschungsanstalt für Agrarwirtschaft und Landtechnik Tänikon: FAT-Berichte, FAT (1998).
- [15] Brito-Espino, S., Ramos-Martín, A., Pérez-Báez, S. O., Mendieta-Pino, C., and Leon-Zerpa, F., “A framework based on finite element method (fem) for modelling and assessing the affection of the local thermal weather factors on the performance of anaerobic lagoons for the natural treatment of swine wastewater,” *Water* **13**(7) (2021).