

EL MODELO DE DIGESTIÓN ANAERÓBICA IWA-ADM1: UNA REVISIÓN DE SU EVOLUCIÓN

THE ANAEROBIC DIGESTION MODEL IWA-ADM1: A REVIEW OF ITS EVOLUTION

Víctor Rivera-Salvador¹; Juan S. Aranda-Barradas¹; Teodoro Espinosa-Solares^{2,3*};
Fabián Robles-Martínez¹; J. Ulises Toledo³

¹Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología, Instituto Politécnico Nacional. Av. Acueducto s/n,
La Laguna Ticomán, Distrito Federal, C. P. 07340. MÉXICO.

²Departamento de Ingeniería Agroindustrial, Universidad Autónoma Chapingo. Carretera México-Texcoco, km 38.5,
Chapingo, Estado de México, C. P. 56230. MÉXICO.

³Gus R. Douglass Land-Grant Institute, West Virginia State University, P.O. Box 1000. Institute, WV 25112-1000, USA.
Correo-e: t.espinosa.s@taurus.chapingo.mx (*Autor responsable).

RESUMEN

El Modelo de Digestión Anaeróbica (ADM1 por sus siglas en inglés) es un modelo estructurado que representa sustratos complejos por sus principales componentes, e incluye múltiples pasos que describen los procesos bioquímicos y fisicoquímicos del proceso anaeróbico de biodegradación de compuestos orgánicos complejos. El modelo ADM1 tiene como objetivo crear una plataforma común para el desarrollo de simulaciones para un rango amplio de procesos específicos. Muchas extensiones y modificaciones del ADM1 se han propuesto para mejorar sus estimaciones y aumentar su capacidad de manejar distintos sustratos sometidos a fermentación y no incluidos en el modelo original. El propósito de esta revisión es presentar una visión general del ADM1, de su importancia como una plataforma para el desarrollo de simulaciones para una amplia variedad de procesos específicos y del desarrollo que ha tenido desde su publicación en el año 2002. Se discuten aplicaciones diversas del modelo, modificaciones a la estructura original, así como el uso de nuevos métodos que han permitido mejorar la capacidad predictiva del modelo o lograr una descripción mejor del sistema. El número de publicaciones del ADM1 se ha incrementado en los últimos años, con un crecimiento importante a partir del 2006. Las aplicaciones del ADM1 incluyen, entre otras, sistemas de tratamiento de aguas residuales, tratamiento anaeróbico de sustratos diversos y distribución de parámetros cinéticos y de variables para buscar una descripción más real de un sistema físico. La relativa facilidad de manipulación y la generalidad del modelo permiten la incorporación de fenómenos de inhibición, la consideración de la diversidad microbiana en el sistema, el acoplamiento con el *Activated Sludge Model*, la determinación de indicadores de estabilidad y otras técnicas novedosas que permiten mejorar aún más las cualidades y ventajas del modelo.

Palabras clave adicionales: biorreactores anaeróbicos, sistemas de tratamiento anaeróbico, modelos cinéticos.

ABSTRACT

The IWA-Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) is a structured model that represents complex substrates by their main components; it includes multiple steps to describe biochemical and physicochemical processes involved in anaerobic digestion of complex organic compounds biodegradability. The aim of ADM1 is to create a common framework to develop the simulations of a widely rank of specific processes. Many extensions and modifications of the ADM1 model have been proposed to improve the outputs of the model and to enlarge its capability to handle different substrates exposed to fermentation and not included in the original ADM1. The objective of this review is to provide a general panorama about Anaerobic Digestion Model No. 1 its importance like a common framework to develop a widely specific processes simulations and its development since it was

published in 2002. Diverse model applications, original framework modifications and the use of novel methods to increase the predictive capability of the model are discussed. The number of published references about ADM1 has increased in the last years, mainly since 2006. Applications vary from model implementations in wide-plant treatment systems, anaerobic treatment of diverse substrates, kinetic parameters and variables distribution for a more realistic description of the system. The generic model and the relatively easy way to handle the model allow including inhibition phenomena, to consider microbial diversity or an ADM1-ASM coupled, to get key indicators for digester stability and to introduce novel techniques to increase the model performance, quality and advantages.

Additional key words: anaerobic bioreactors, anaerobic treatment systems, kinetic models.

INTRODUCCIÓN

Los residuos de granjas pecuarias y de la creciente industria del bioprocesamiento pueden causar problemas ambientales y de salud, si no reciben algún tratamiento y son depositados inadecuadamente. Sin embargo, estos residuos después de recibir un tratamiento aeróbico o anaeróbico se pueden usar como suplementos benéficos para la producción agrícola y como fuente de energía usando la digestión anaeróbica. La utilización de residuos agropecuarios y otras biomásas para la producción de energía se reconoce como una prioridad alta en los Estados Unidos y una prioridad creciente en el mundo entero (Vertes *et al.*, 2006).

Los residuos orgánicos constituyen una fuente importante de biomasa que se puede convertir en energía a través de la digestión anaeróbica. Los sistemas de tratamiento anaeróbico son sistemas biológicos que operan en ausencia de oxígeno, y son muy adecuados para el tratamiento de residuos altamente biodegradables (Kassam *et al.*, 2003). Los digestores anaeróbicos contribuyen de manera significativa a la sustentabilidad ambiental a través de la estabilización de residuos orgánicos y remoción de patógenos, lo que trae como resultado la conservación de la buena calidad de las cuencas hidrográficas por la no disposición incontrolada de residuos frescos (De Baere, 2000; Erickson, 2000; Jewell, 2000). Los digestores anaeróbicos han sido desarrollados para una variedad de aplicaciones donde se recupera la energía en forma de biogás, por su contenido de metano (Stafford *et al.*, 1980; Jewell, 2000; AgStar Digest, 2006).

Los modelos matemáticos de digestión anaeróbica han sido investigados ampliamente y se han desarrollado para entender aspectos como la distribución de desechos y biomasa metanogénica dentro de un biorreactor (Vavilin y Angelidaki, 2005), o la dinámica del comportamiento en fases transitorias (Escudíe *et al.*, 2005).

A pesar del importante avance que se ha logrado en el desarrollo de la tecnología de la digestión anaeróbica, hace falta optimizar aspectos del proceso que permitan su incorporación a nivel industrial. Las técnicas de modelado se pueden usar para predecir el comportamiento de procesos en diferentes escenarios y auxiliar el manejo operacional para desarrollar estrategias que mejoren la estabilidad del proceso (Silva *et al.*, 2009).

Los modelos matemáticos se han constituido en una herramienta básica para el diseño, operación y control de los sistemas anaeróbicos (Lubken *et al.*, 2007) y han generado un área activa de investigación (López y Borzacconi, 2009), lo que

se refleja en un incremento considerable, en los últimos años, del número de trabajos enfocados al desarrollo de modelos matemáticos para la digestión anaeróbica reportados en ISI (Batstone *et al.*, 2005).

Los modelos matemáticos, enfocados al entendimiento y optimización del proceso de digestión anaeróbica, describen estas reacciones en forma estructurada, siendo el IWA-Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) el ejemplo mejor establecido (Ramírez *et al.*, 2009). La finalidad de este modelo fue la creación de una plataforma común para el desarrollo de simulaciones aplicables a un amplio rango de procesos específicos (Silva *et al.*, 2009). El objetivo del presente trabajo fue presentar una revisión crítica sobre los cambios que ha experimentado el ADM1 desde sus inicios y consecuentemente los alcances y aplicaciones que se pueden tener.

El IWA-Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)

En 2002, un grupo de investigación denominado “*Task group for mathematical modelling of Anaerobic Digestion Processes*” publicó el Reporte Técnico y Científico del modelo IWA-ADM1 (*Internacional Water Association-Anaerobic Digestion Model No. 1*), o simplemente ADM1, para la simulación del proceso de digestión anaeróbica. Este modelo fue desarrollado por el grupo de especialistas en digestión anaeróbica y fue presentado por primera vez durante la Novena Conferencia de Digestión Anaeróbica en Bélgica durante 2001, con el objetivo de ofrecer una herramienta útil en el desarrollo, operación y optimización de procesos (Batstone *et al.*, 2002).

El modelo de digestión anaeróbica (ADM1) es un modelo estructurado que describe sustratos complejos por sus principales componentes (carbohidratos, lípidos, proteínas, azúcares, aminoácidos, ácidos grasos de cadena larga, ácidos grasos volátiles, aniones y cationes), e incluye múltiples pasos que describen los procesos bioquímicos y fisicoquímicos que se encuentran en el proceso anaeróbico de biodegradación de compuestos orgánicos complejos (Batstone *et al.*, 2002). En el caso de sustratos heterogéneos, como el estiércol líquido, se debe realizar una caracterización detallada, razonable y apropiada del líquido alimentado, determinando la distribución proporcional de carbohidratos, lípidos, proteínas y constituyentes inertes (Schoen *et al.*, 2009).

El ADM1 toma en cuenta los procesos de desintegración de sólidos complejos, hidrólisis de partículas orgánicas, degradación de sustrato y crecimiento y muerte de biomasa (Mu *et al.*, 2008). Además, se describe la inhibición de la digestión

anaeróbica por medio de modelos de inhibición no competitiva (para la inhibición por hidrógeno y amoníaco libre), consumo competitivo (para la competencia entre butirato y valerato) y la inhibición por pH (Batstone *et al.*, 2002). Su uso permite la simulación de la producción y composición del biogás producto de la digestión anaeróbica (Lubken *et al.*, 2007).

El ADM1 es un modelo cinético de aplicación universal que permite la descripción matemática de la digestión anaeróbica de diferentes tipos de sustratos orgánicos (Schoen *et al.*, 2009), en él la hidrólisis y la muerte microbiana se describen por cinéticas de primer orden, y la ecuación de Monod se usa para interpretar el consumo de los compuestos solubles y la producción de gas (Lubken *et al.*, 2007; Zhao *et al.*, 2009); además, se asume que bajo condiciones anaeróbicas los carbohidratos se hidrolizan más rápido que las proteínas y los lípidos (Lubken *et al.*, 2007). El modelo considera siete grupos de bacterias con diferentes actividades que han sido formuladas en 26 variables de estado dinámicas de concentración, 19 procesos cinéticos bioquímicos, tres procesos cinéticos de transferencia gas-líquido y ocho variables algebraicas implícitas, si se formula como un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales (DAE) (Batstone *et al.*, 2002; Penumathsa *et al.*, 2008), o en el caso de una implementación como un sistema de ecuaciones diferenciales (DE) no lineales (Silva *et al.*, 2009) tiene 32 variables de estado dinámicas de concentración y seis procesos cinéticos ácido-base adicionales (Batstone *et al.*, 2002).

El sistema fisicoquímico se puede definir como un conjunto de procesos no biológicamente mediados que ocurren comúnmente en reactores anaeróbicos (Batstone *et al.*, 2002). Hay tres tipos de procesos fisicoquímicos amplios que se dividen de acuerdo a su velocidad cinética:

- Procesos líquidos unifásicos (asociación/disociación de iones).
- Procesos de gas-líquido (transferencia de líquido a gas, principalmente H_2 , CH_4 y CO_2).
- Procesos líquido-sólidos (precipitación/solubilización) que generalmente no se consideran en el modelo.

Todos los procesos anaeróbicos simulados en el ADM1, biológicos y fisicoquímicos, excepto quizá la desintegración e hidrólisis, son afectados por la competencia por sustrato, inhibición por H_2S o reacciones ácido-base y transferencia gas-líquido del H_2S (Batstone *et al.*, 2002). Asimismo, todos los procesos microbianos mediados por la conversión del sustrato están sujetos a inhibición por valores de pH extremos (Ramírez *et al.*, 2009). Batstone *et al.* (2002) reportaron que debido a la complejidad del modelo hay algunos procesos que se excluyen del mismo, entre los cuales están la producción de lactato por fermentación de glucosa, la reducción del sulfato e inhibición por sulfuro, inhibición por ácidos grasos de cadena larga, consumo competitivo de H_2 y CO_2 entre arqueas metanogénicas hidrogenotróficas y bacterias homoacetogénicas y la precipitación de sólidos debido a la alta alcalinidad u otras reacciones químicas de precipitación.

Historia del ADM1

Desde su publicación en 2002, muchas extensiones y modificaciones del ADM1 se han hecho para mejorar las estimaciones del modelo y aumentar su capacidad de manejar otros compuestos principales en sustratos sometidos a fermentación y no incluidos en el modelo original (Batstone *et al.*, 2005; Lubken *et al.*, 2007; Derbal *et al.*, 2009; Fezzani y Cheikh, 2009). El número de trabajos reportados en la literatura referentes a la aplicación del ADM1 ha ido desde entonces incrementándose paulatinamente (Figura 1), y el éxito del ADM1 se puede atribuir a la generalidad y manipulación del modelo, además de que existen una gran variedad de sistemas anaeróbicos que pueden representarse por el mismo, con lo que se puede describir el comportamiento cinético de sistemas operados en lote o “batch” (donde el flujo de entrada y salida es igual a cero), sistemas continuos (flujo con valor constante en el tiempo), sistemas de lote alimentado o “fed-batch” (valor de flujo igual a cero en los primeros momentos del sistema y adopción posterior de un valor constante hasta el final del proceso) e incluso con sistemas semicontinuos (flujo con valor igual a cero en ciertos intervalos de tiempo).

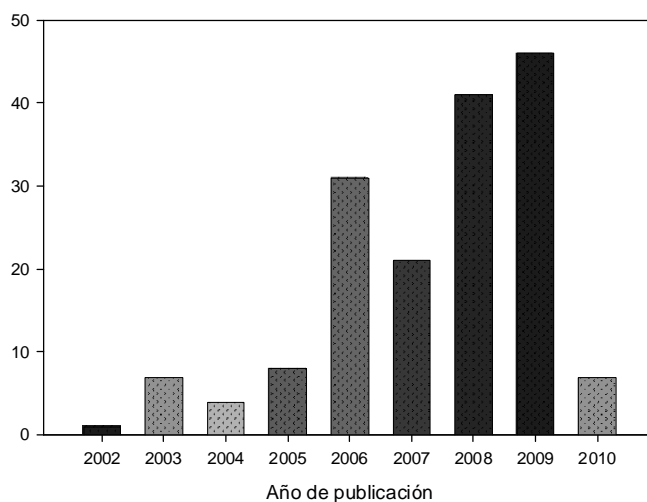


Figura 1. Publicaciones relacionadas al Anaerobic Digestion Model No. 1 por año desde su publicación en 2002 hasta enero de 2010. Se consideraron las publicaciones de las bases de datos de ELSEVIER, PUBMED y SPRINGER.

La utilización del modelo ha sido variada, y en las siguientes secciones se hará una breve discusión de algunos de los trabajos publicados, donde éstos se clasificaron de acuerdo a la finalidad para la que fue utilizado el ADM1. Asimismo, el Cuadro 1 presenta un panorama general de los cambios que ha experimentado. Los temas se extienden desde la observación de detalles referentes al modelo y la forma de mejorar la simulación y/o los parámetros seguidos por la aplicación a sistemas de tratamiento de residuos industriales reales, sin realizar grandes cambios al modelo, para posteriormente abordar algunas modificaciones de su estructura general utilizadas en la descripción de procesos tales como la co-digestión y remoción

anaeróbica de materiales celulósicos o de compuestos fenólicos, la inhibición por fármacos o la incorporación de diversidad microbiana en el modelo. Finalmente, se discuten algunos trabajos que utilizan el ADM1 con otras técnicas como los parámetros distribuidos, el acoplamiento ADM1-ASM para la simulación integral del proceso completo de una planta de tratamiento de aguas residuales, la determinación de indicadores de estabilidad y otras técnicas novedosas que permiten mejoras significativas en las aplicaciones.

Afinando el ADM1

De acuerdo a Boltes *et al.* (2008), las publicaciones más recientes sobre la aplicación del ADM1 reportan una revisión necesaria de los parámetros cinéticos usados para la degradación de ácidos grasos volátiles (AGVs), por lo cual estos autores presentan un estudio cinético de la degradación anaeróbica de los AVGs evaluados en un tanque reactor agitado continuo y por lotes de 2 L, empleando un modelo de caja negra para la simplificación del estudio cinético y con sólo cuatro expresiones cinéticas relacionadas a la descripción del consumo de AGVs, producción de biomasa y generación de metano. Una buena correlación entre simulación y datos experimentales se obtuvo para AGVs, biomasa, metano y CO₂ tanto en modo continuo como en lote.

Así también, la digestión anaeróbica de pastos ensilados ha sido simulada con el ADM1 (Wichern *et al.*, 2009). En este trabajo se usó la función de algoritmos genéticos de Matlab/Simulink para calibrar el modelo; los resultados de la calibración indican que la inhibición por NH₃, usada para modelar la inhibición de consumo de acetato, es de tres a cinco veces más alta comparada con la digestión de lodos activados (Wichern *et al.*, 2009). Los algoritmos genéticos de optimización estocástica tienen la ventaja de resolver problemas complejos y no lineales, y se han usado ampliamente en muchas aplicaciones para producir una solución óptima global (Jeong *et al.*, 2005).

Silva *et al.* (2009) presentaron la aplicación del modelo ADM1 para describir el comportamiento dinámico de un reactor anaeróbico para el tratamiento de los efluentes condensados (EC) de un molino de pulpa con sulfito (una operación de la industria de pulpa y papel), los cuales contienen ácido acético que los hace adecuados para el tratamiento por digestión anaeróbica. En este trabajo se predice y optimiza el proceso para cargas orgánicas altas usando una fuente externa de carbono para incrementar la estabilidad del proceso en un reactor de 5 L a 35 °C. Los resultados indicaron que el incremento de la carga hasta 0.55 kg_{CO₂}·m⁻³·d⁻¹ no afecta la remoción de la materia orgánica (cerca del 90 %), aunque después de este valor de carga la caída en la remoción fue evidente y se interpretó como una inhibición por sustrato. Estos resultados ilustran que no siempre se requiere una alta precisión de todas las predicciones del modelo, puesto que solamente un número limitado de las salidas de la simulación son de relevancia, y la precisión de éstas se puede determinar bien con alguna estimación particular de parámetros (Silva *et al.*, 2009).

Aplicación a sistemas reales de tratamiento industrial

Batstone y Keller (2003) aplicaron el ADM1 para evaluar dos digestores industriales. En el primero se evaluó la adición de ácido para reducir el pH y evitar la precipitación de carbonato de calcio (CaCO₃) en un reactor UASB (manta de lodos anaeróbicos de flujo ascendente) de una industria papelera, donde el trabajo de simulación encontró que la adición de ácido no fue económica para el control del pH, ni tuvo efectos reales en los niveles de CaCO₃ presentes en el reactor. En el segundo caso, se determinaron los beneficios de la operación termofílica (en oposición a la operación mesofílica) para disminuir la inhibición por amonio y mejorar la estabilidad y producción de gas en un digestor de sólidos de una empresa de producción de gelatina. Se predijo que la operación termofílica no podría lograr la meta a una proporción satisfactoria (Batstone y Keller, 2003). En ambos casos se demostró la poca efectividad de las acciones propuestas sin gastos innecesarios y sin comprometer el funcionamiento del biorreactor.

La co-digestión de residuos orgánicos con lodos activados en una planta de tratamiento de aguas residuales municipales de 2000 m³ a 37 °C, tiempo de retención hidráulico (TRH) de aproximadamente 26.9 días y una velocidad de carga de 1.01 kg_{SSV}·m⁻³·d⁻¹ es presentada en el trabajo de Derbal *et al.* (2009). A pesar de que el ADM1 mostró resultados aceptables en la simulación, los autores concluyen que el modelo es relativamente limitado en la simulación de procesos complejos como la digestión anaeróbica, debido a que en este trabajo el ADM1 no pudo reproducir las variaciones insinuadas de los parámetros, lo cual se atribuyó a que no todos los parámetros cinéticos de entrada se obtuvieron por análisis experimental, sino de la literatura (Derbal *et al.*, 2009).

Modificaciones a la estructura general del ADM1

En el trabajo de Lubken *et al.* (2007) se muestra la aplicación del ADM1 para simular la producción de energía en la co-digestión de estiércol de vaca y cultivos utilizados para la producción de energía renovable (ensilado de maíz y gramíneas, *pellets* de soya y heno) de un digestor de escala piloto de 3.5 m³. En el modelo se considera que la energía se produce principalmente como gas, y en menor medida como calor microbiano; de la misma manera, el consumo energético se debe al bombeo, agitación, calentamiento del sustrato y a la compensación de pérdidas por radiación (Lubken *et al.*, 2007). Aquí es precisamente en el calor microbiano producido donde intervienen principalmente las simulaciones con el ADM1, y, bajo el modelo propuesto por los autores, el calor liberado debido a la degradación microbiana de orgánicos compensó 11 % aproximadamente de la energía necesaria para el calentamiento del sustrato (Lubken *et al.*, 2007).

A pesar de la importancia de la digestión anaeróbica de materiales lignocelulósicos, sólo un número limitado de estudios se han llevado a cabo para evaluar la cinética de digestión de estos materiales, y la información sobre el desarrollo de modelos de este proceso es limitada. En el trabajo de Zhao *et al.* (2009) el

Cuadro 1. Algunas modificaciones al modelo ADM1 reportadas en la literatura.

Aportación	
Batstone et al. (2002):	Estructura genérica del proceso de digestión anaeróbica. Como un sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas hay 26 variables de estado dinámicas de concentración, 19 procesos bioquímicos y 3 procesos de transferencia de gas y 8 variables algebraicas implícitas. Como un sistema de ecuaciones diferenciales hay 32 variables de estado dinámicas de concentración y 6 procesos ácido-base.
Batstone et al. (2003):	Modificaciones para la degradación de <i>i</i> -valerato. El modelo se modificó para permitir la inclusión de <i>n</i> -valerato con una ecuación cinética de consumo competitivo. Adición de una variable de estado dinámica (<i>i</i> -valerato total) y una variable algebraica (ion <i>i</i> -valerato).
Jeong et al. (2005):	Se analizó la sensibilidad de los parámetros cinéticos y estequiométricos en la degradación anaeróbica de glucosa. Se utilizaron sólo 5 procesos: consumo de azúcares, consumo de butirato, consumo de propionato, consumo de acetato y consumo de hidrógeno.
Straub et al. (2006):	El ADM1 se empleó para evaluar el efecto de las variaciones en la hidrólisis de sólidos y en la estabilidad en procesos metanogénicos acetoclásticos en un exceso de acetato utilizado. Se incorporaron estructuras hidrolíticas, rutas simples y duales, así como estructuras de población acetoclástica simple y competitiva.
Batstone y Keller (2003):	Se incluye una ecuación adicional para describir la precipitación de CaCO ₃ en un reactor UASB alimentado con efluentes de una fábrica de papel.
Batstone (2006):	Menciona el uso de los modelos anaeróbicos en general y aplicación a sistemas domésticos de aguas sucias. Requerimientos para análisis operacional, desarrollo de tecnología y diseño con base en el modelo. Propone una ecuación adicional para situaciones donde se necesite representar la reducción del sulfato.
Fuentes et al. (2008):	Un reactor anaeróbico de lecho fluidizado se representa por medio de cuatro modelos: un modelo de digestión anaeróbica, un modelo de biopelícula, un modelo de partícula y un modelo hidrodinámico.
Campos y Flotats (2003):	Se desarrolló un algoritmo para la simulación dinámica del pH. Incrementa el número de variables de estado a 33 y el número de procesos a 22.
Shimada et al. (2007):	ADM1 se modificó para incluir la acumulación y degradación de trealosa. La hidrólisis de polímeros complejos y la fermentación de productos de la hidrólisis no se incluyen. La biomasa muerta resulta en la producción de partículas inertes. Los productos microbianos solubles y la producción de butirato se desprecian. Un proceso adicional describe la conversión de glucosa a un carbohidrato de reserva y la subsecuente hidrólisis de este polímero.
Gali et al. (2009):	La modificación en este caso utiliza ecuaciones diferenciales en lugar de ecuaciones algebraicas. 32 procesos (19 procesos biológicos, 10 procesos de equilibrio y 4 procesos de transferencia de gas). 41 componentes divididos en 24 compuestos solubles, 13 compuestos en forma de partícula y 4 compuestos gaseosos.
Ramirez et al. (2009):	El modelo se modificó para considerar una mayor diversidad microbiana (10 especies en cada grupo de biomasa funcional). El modelo extendido (ADM1_10) incluye 70 diferentes especies de biomasa, 87 variables de estado en total y 154 reacciones asociadas.
Zhao et al. (2009):	ADM1 se desarrolló para describir la conversión anaeróbica de plantas acuáticas ricas en lignocelulosa. El modelo cinético describe las relaciones entre tres especies: sustrato, productos y microorganismos. Once bioprocesos y cuatro clases de microorganismos.
Batstone et al. (2004):	Se examinó la estructura de cuatro tipos de gránulos y su relación con la cinética de degradación de sustrato. Los gránulos se representaron usando un modelo de parámetros distribuidos. Además de un modelo de parámetros de biopelícula usando una aproximación de primer orden en las ecuaciones diferenciales parciales que representan la profundidad de la biopelícula.
Tartakovsky et al. (2008) y Mu et al. (2008):	El modelo, nombrado ADM1d, combina cinéticas de crecimiento de biomasa del ADM1 con transformación del sustrato con balances de masa de dispersión axial. El modelo de parámetros distribuidos consta de 36 ecuaciones diferenciales parciales (12 ecuaciones de balance para materiales solubles, 12 para material en partículas, 9 iones y 3 para gases). 72 ecuaciones diferenciales ordinarias (dos condiciones de frontera para 36 componentes) y 33 ecuaciones algebraicas para los balances de masa completos de los 33 componentes del líquido.
Batstone et al. (2006):	Desarrollo de un modelo de biopelícula usando modelado multidimensional. El emallado de alta resolución tiene 315 x 513 elementos con 12 componentes químicos y 7 ácidos bases iónicas (aproximadamente 5 x10 ⁶ ecuaciones algebraicas implícitas) para resolverse simultáneamente.
Fuentes et al. (2009):	Presenta un modelo heterogéneo de un sistema de tres fases para investigar el comportamiento biológico e hidrodinámico de un reactor anaeróbico de lecho fluidizado. Considera las ecuaciones del ADM1 y un modelo general de dispersión axial para representar el comportamiento hidrodinámico por balances de materia y <i>momentum</i> .

ADM1 se usó para describir la conversión anaeróbica de plantas acuáticas ricas en material lignocelulósico por microorganismos del rumen, considerando la existencia de microorganismos de rápida y lenta degradación en un tanque agitado de 5 L a 39 °C.

El modelo fue capaz de simular y predecir la degradación anaeróbica de espadaña (una planta acuática de origen chino rica en celulosa), aunque también el crecimiento celular y la formación de productos en fases líquida y gaseosa bajo

diferentes condiciones. Además, la remoción de sólidos volátiles por microbios del rumen alcanzó cerca del 70 % del material. Los resultados de este estudio pueden ser valiosos en el diseño, monitoreo, análisis y optimización del proceso de digestión anaeróbica para el tratamiento de sustratos complejos como las plantas (Zhao *et al.*, 2009).

Galí *et al.* (2009) examinaron, evaluaron y analizaron la biodegradabilidad de residuos de manzana, pera, naranja, uva, girasol, estiércol de cerdo y glicerol para cuantificar el potencial de producción de metano en un tanque agitado semicontinuo de 4 L; en este caso el ADM1 se utilizó considerando la desintegración como el paso limitante en la digestión anaeróbica de los residuos. Adicionaron diez términos de equilibrio o compensación considerando la carga de los compuestos elementales (N, C, P y S), además del H_2S en los estados soluble y gaseoso, formando así una matriz donde se expresan las cantidades de carbono, nitrógeno, fósforo y las cargas de cada componente. Con esto se conformó una herramienta importante para aplicar la ecuación de continuidad para cada uno de los 32 procesos para C, N, P y las cargas; de esta forma fue posible obtener la estequiometría para los componentes S_{CO_2} , $S_{NH_4^+}$, $S_{HPO_4^{2-}}$ y S_{H^+} . Los datos generales requeridos para alimentar el modelo, en este caso, fueron el tiempo de retención hidráulica (TRH), temperatura de operación (T), volumen de líquido (V_{liq}) y el número de veces que el reactor se alimenta en un día. La modificación al modelo produce resultados satisfactorios y constituye una herramienta excelente para diseñar y monitorear la operación de digestores (Galí *et al.*, 2009).

Los compuestos fenólicos en sustratos complejos tales como en residuos sólidos y las aguas residuales de la industria de aceitunas en la digestión anaeróbica, también han sido recientemente descritos (Fezzani y Cheikh, 2009). Estos compuestos fenólicos presentan un efecto inhibitorio en los procesos de fermentación y en las poblaciones metanogénicas, como la inhibición no competitiva. En ese trabajo, la conversión de compuestos fenólicos solubles en acetato fue expresada por la ecuación cinética de crecimiento de Haldane. Las concentraciones de fenol soluble en el efluente, así como la velocidad de producción de biogás a bajas velocidades de alimentación y en el periodo estacionario a velocidades altas de alimentación, fueron estimadas adecuadamente con esta extensión del modelo, no así el periodo transitorio a velocidades altas de alimentación, lo cual se atribuye a inconsistencias debidas a la correlación de parámetros con la configuración del reactor (como el $k_L a$) o a las constantes de hidrólisis (Fezzani y Cheikh, 2009).

El ADM1 también ha servido para obtener la simulación de la inhibición causada por productos como los farmacéuticos (cloruro de propranolol, ofloxacina y diclofenaco de sodio) mediante una función de inhibición no competitiva modificada; estos compuestos resultan importantes debido a su baja biodegradabilidad y a su naturaleza hidrofóbica, y, aunque los diversos fármacos causan un grado de inhibición a la digestión anaeróbica, el propranolol ha resultado ser el más inhibitorio en

poblaciones de acetógenos y metanogénicos acetoclastos (Fountoulakis *et al.*, 2008).

Por otro lado, la evidencia experimental sugiere que la estructura y propiedades de una comunidad microbiana puede estar influida por la operación del proceso y a su vez determinar la funcionalidad del reactor. Para describir estos fenómenos, los modelos matemáticos necesitan considerar la diversidad microbiana fundamental (Ramirez *et al.*, 2009). Con el fin de resolver este inconveniente, Ramirez *et al.* (2009) propusieron una interesante extensión del ADM1 para describir la diversidad microbiana entre organismos del mismo grupo funcional, y para lo cual utilizaron vinaza como sustrato en un reactor de cama filtro de lodos anaeróbicos de flujo ascendente (UASFB) de 9.8 L. El número de especies que describen una misma reacción se estableció arbitrariamente en 10 (ADM1_10), y los parámetros cinéticos k_s y k_m fueron aleatoriamente seleccionados de una distribución normal bimodal.

A pesar de que cualitativamente el ADM1_10 parece ajustarse mejor a los datos experimentales que el modelo original ADM1, la principal diferencia entre estos dos modelos radica en las evoluciones de la biomasa (Ramirez *et al.*, 2009). Aunque no se supiera exactamente la diversidad de los diferentes grupos funcionales o cómo esta diversidad se mantiene, la propuesta de estos autores se puede usar para analizar la influencia de las condiciones del proceso en la selección de ciertos tipos de especies y en manejar la diversidad microbiana.

Penumathsa *et al.* (2008) usaron una aproximación estequiométrica variable derivada de información experimental para modificar la estructura del ADM1 y permitir la variación dinámica de los rendimientos de los productos de la degradación de azúcares, con el fin de representar sistemas anaeróbicos no metanogénicos, esto en un reactor completamente mezclado de 9.5 L. Estas modificaciones brindan buenas predicciones en la producción continua de hidrógeno, con lo cual se extiende la aplicabilidad del modelo a sistemas anaeróbicos no fermentativos como la producción de hidrógeno, digestión anaeróbica en dos etapas y posiblemente otros sistemas de fermentación (Penumathsa *et al.*, 2008).

El ADM1 y los parámetros distribuidos

El ADM1 se ha usado para desarrollar la simulación del proceso de digestión anaeróbica en digestores de manta de lodos anaeróbicos de flujo ascendente (UASB) basado en un modelo de parámetros distribuidos para describir los gradientes de los materiales compuestos, ácidos grasos volátiles, pH y sólidos volátiles sobre la altura del reactor; su capacidad de predecir la distribución espacial puede ser muy útil en el desarrollo de una aproximación sistemática para el diseño de reactores UASB y en reactores con mezclado limitado y cargas orgánicas altas (Mu *et al.*, 2008). La validación de este modelo también ha sido publicada por Tartakovsky *et al.* (2008) en un reactor UASB de 10 L con buenos resultados, concluyendo que la habilidad de distribución espacial del modelo de los componentes de la fase líquida tiene el potencial de integrarse en un sistema de control del proceso.

Problemas de estabilidad de los digestores anaeróbicos con el ADM1

En situaciones de sobrecarga en digestores anaeróbicos, el ADM1 se ha utilizado para derivar indicadores que se pueden usar para investigar la relación entre la estabilidad del digestor y las dinámicas de la biomasa; esto es importante porque cuando la metanogénesis no es lo suficientemente rápida debido a alguna perturbación, como la acumulación de ácidos grasos volátiles, puede conducir a una caída del pH y al cese de la producción de metano. Para este propósito, los cálculos de diferentes índices claves para la estabilidad del digestor se implementaron en los modelos (Schoen *et al.*, 2009). La relación alimentación/microorganismos (F/M), AGV/ alcalinidad y el número de capacidad de acetato (ACN) resultaron buenos indicadores de estabilidad, y mostraron claramente cuándo un digestor puede fallar y evitarlo antes de tiempo (Schoen *et al.*, 2009).

Acoplamiento de los modelos ADM1 y ASM1

Una de las ventajas importantes del ADM1 es la capacidad de acoplarse a otros modelos, como el ASM1, para poder realizar la simulación de plantas completas de tratamiento de residuos, donde tienen lugar tanto sistemas de degradación aeróbica como anaeróbica (Rosen *et al.*, 2006), o simplemente tomar alguna parte de alguno de los modelos para generar un modelo más completo. Muchos aspectos relacionados con la rigidez del sistema (un problema común en simulaciones), acoplamiento de ADM1 con ASM, balances de masa, equilibrio ácido-base y soluciones algebraicas para el pH en la implementación a una planta completa de tratamiento, son ampliamente discutidos en el trabajo de Rosen *et al.* (2006).

Los digestores anaeróbicos termofílicos autotérmicos (ATAD por sus siglas en inglés) son sistemas avanzados de tratamiento de lodos de aguas cloacales para brindar higienización, manteniendo por sí mismos temperaturas de al menos 55 °C por 20 h, con lo que se logra la remoción de patógenos. El modelo para estos sistemas, propuesto por Gómez *et al.* (2007), incluye las transformaciones bioquímicas basadas en el *Activated Sludge Model* (ASM), así como las transformaciones fisicoquímicas de la forma propuesta en el ADM1, y también incluye un balance de energía con el fin de predecir la temperatura del sistema. En estos sistemas la velocidad de hidrólisis de sustrato en forma de partícula incluye degradaciones aeróbica y anaeróbica, dependiendo de la concentración de oxígeno disuelto, puesto que las condiciones limitadas de oxígeno del reactor ATAD implican que el proceso no es absolutamente aeróbico ni anaerobio (Gómez *et al.*, 2007). En este caso, los autores concluyen que la estructura flexible del modelo facilita la modificación del conjunto de transformaciones y permite la fácil conexión con otros modelos de procesos unitarios para lograr simulaciones de configuraciones de plantas de tratamiento más complejas (Gómez *et al.*, 2007).

Aspectos de modelación avanzada en el ADM1

Recientemente, en el 2009, el modelo ADM1 se aplicó a sistemas de biopelícula para describir el esquema de degradación

del sustrato en un sistema de tres fases (sólido-líquido-gaseoso), y también para investigar el comportamiento biológico e hidrodinámico de reactores anaeróbicos de lecho fluidizado (Fuentes *et al.*, 2009). El modelo global involucra ecuaciones diferenciales de balance de masa y momento para las tres fases, ecuaciones de balance de masa para los componentes inmersos en una fase y ecuaciones algebraicas para considerar los procesos bioquímicos y fisicoquímicos que toman lugar en el biorreactor (Fuentes *et al.*, 2009). Una característica clave del modelo es la predicción simultánea de las fases y los componentes dinámicos, incluyendo el efecto del crecimiento de la biopelícula en las características de fluidización e interacción (Fuentes *et al.*, 2009).

CONCLUSIONES

El modelo de digestión anaeróbica (ADM1) es un modelo estructurado que permite la descripción del proceso de digestión anaeróbica para la biodegradación de compuestos orgánicos complejos por sus procesos bioquímicos y fisicoquímicos; considera los procesos de desintegración, hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis.

El ADM1 es un modelo cinético de aplicación universal que permite la descripción matemática de la digestión anaeróbica de diferentes tipos de sustratos orgánicos, tales como los materiales celulósicos, compuestos fenólicos y residuos agropecuarios, entre otros.

La generalidad y relativa facilidad de adaptación del modelo permite incluir fenómenos como la inhibición por fármacos, o considerar la diversidad microbiana de los sistemas físicos o la determinación de indicadores de estabilidad. El ADM1 también puede ser acoplado al ASM (*Activated Sludge Model*) para la simulación del proceso de una planta de tratamiento de aguas residuales. Otras técnicas novedosas de modelación o simulación incorporadas al ADM1 permiten mejoras sustantivas en las aplicaciones del modelo.

Una desventaja del ADM1 (y probablemente la principal) es que, debido a su complejidad, la reducción del sulfato y por tanto la formación de H₂S no se incluye, por lo que es incapaz de modelar sistemas con bajas o medianas cantidades de sulfuro. Se consideraría de mucha utilidad que ADM1 incluyera esta vía metabólica, debido a que la reducción de sulfato es una ruta metabólica que compite con la metanogénesis, y también por la alta toxicidad y capacidad de corrosión que presenta el H₂S.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo brindado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), la Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología (UPIBI-IPN), la Universidad Autónoma Chapingo (UACH) y el Gus R. Douglass Land-Grant Institute, West Virginia State University por todas las facilidades brindadas para realizar el presente trabajo.

LITERATURA CITADA

- AgStar Digest. 2006. United States Environmental Protection Agency, EPA-430-F-02-028, www.epa.gov/agstar.
- Batstone D. J.; Keller J.; Angelidaki I.; Kalyuzhnyi S.; Pavlostathis S. G.; Rozzi A.; Sanders W. T.; Siegrist H.; Vavilin V. A. 2002. Anaerobic Digestion Model No. 1. International Water Association (IWA) Publisher, London. 77 p.
- Batstone D. J.; Keller J. 2003. Industrial applications of the IWA anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). *Water Science and Technology* 47(12): 199-206.
- Batstone D. J.; Pind P. F.; Angelidaki I. 2003. Kinetics of thermophilic, anaerobic oxidation of straight and branched chain butyrate and valerate. *Biotechnology and Bioengineering* 84(2): 195-204.
- Batstone D. J.; Keller J.; Blackall L. L. 2004. The influence of substrate kinetics on the microbial community structure in granular anaerobic biomass. *Water Research* 38: 1390-1404.
- Batstone D. J.; Keller J.; Steyer J. 2005. A Review of ADM1 Extensions, Applications, and Analysis: 2002-2005. *In: Batstone D.J.; Keller J. (Eds.), The First International Workshop on the IWA Anaerobic Digestion Model. IWA Publishing, Copenhagen. pp: 1-10.*
- Batstone D. J. 2006. Mathematical modelling of anaerobic reactors treating domestic wastewater: Rational criteria for model use. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology* 5: 57-71.
- Batstone D. J.; Picioreanu C.; Van Loosdrecht M. C. M. 2006. Multidimensional modelling to investigate interspecies hydrogen transfer in anaerobic biofilms. *Water Research* 40: 3099-3108.
- Boltes K.; Leton P.; Garcia-Calvo E. 2008. Volatile Fatty Acid Anaerobic Degradation: Kinetic Modeling with an Inoculum under Controlled Conditions *Industrial and Engineering Chemistry Research* 47: 5337-5345.
- Campos E.; Flotats X. 2003. Dynamic Simulation of pH in Anaerobic Processes. *Applied Biochemistry and Biotechnology* 109(1-3): 63-76.
- De Baere L. 2000. Anaerobic digestion of solid wastes: State-of-the-art. *Water Science and Technology* 41: 283-290.
- Derbal K.; Bencheikh-lehocine M.; Cecchi F.; Meniai A. H.; Pavan P. 2009. Application of the IWA ADM1 model to simulate anaerobic co-digestion of organic waste with waste activated sludge in mesophilic condition *Bioresource Technology* 100: 1539-1543.
- Escudí R.; Conte T.; Steyer J. P.; Delgenes J. P. 2005. Hydrodynamic and biokinetic models of an anaerobic fixed-bed reactor. *Process Biochemistry* 40: 2311-2323.
- Erickson L. E. 2000. Bioreactors. *In: Encyclopedia of Microbiology, Volume 1, 2nd Ed., J. Ledberg (Ed.). Academic Press.*
- Fezzani B.; Cheikh R. B. 2009. Extension of the anaerobic digestion model No. 1 (ADM1) to include phenolic compounds biodegradation processes for the simulation of anaerobic co-digestion of olive mill wastes at thermophilic temperature. *Journal of Hazardous Materials* 162: 1563-1570.
- Fountoulakis M. S.; Stamatelatos K.; Lyberatos G. 2008. The effect of pharmaceuticals on kinetics of methanogenesis and acetogenesis. *Bioresource Technology* 99: 7083-7090.
- Fuentes M.; Scenna N. J.; Aguirre P. A.; Mussati M. C. 2008. Application of two anaerobic digestion models to biofilm systems. *Biochemical Engineering Journal* 38: 259-269.
- Fuentes M.; Mussati M. C.; Scenna N. J.; Aguirre, P. A. 2009. Global modeling and simulation of a three-phase fluidized bed bioreactor. *Computers and Chemical Engineering* 33: 359-370.
- Galí A.; Benabdallah T.; Astals S.; Mata-Álvarez J. 2009. Modified version of ADM1 model for agro-waste application. *Bioresource Technology* 100(11): 2783-2790.
- Gómez J.; de García M.; Ayesa E.; Garcia-Heras J. L. 2007. Mathematical modelling of autothermal thermophilic aerobic digesters. *Water Research* 41: 959-968.
- Jeong H. S.; Suh C. W.; Lim J. L.; Lee S. H.; Shin H. S. 2005. Analysis and application of ADM1 for anaerobic methane production. *Bioprocess Biosystems Engineering* 27: 81-89.
- Jewell W. J. 2000. Methane Production/Agricultural Waste Management. *Encyclopedia of Microbiology, 2nd Ed., Academic Press.*
- Kassam K.; Yerushalmi L.; Guiot S. R. 2003. A market study on the anaerobic wastewater treatment systems. *Water, Air, and Soil Pollution* 143: 179-192.
- López I.; Borzacconi L. 2009. Modelling a full scale UASB reactor using a COD global balance approach and state observers. *Chemical Engineering Journal* 146: 1-5.
- Lubken M.; Wichern M.; Schlattmann M.; Gronauer A.; Horn H. 2007. Modelling the energy balance of an anaerobic digester fed with cattle manure and renewable energy crops. *Water Research* 41(18): 4085-96.
- Mu S. J.; Zeng Y.; Wu P.; Lou S. J.; Tartakovsky B. 2008. Anaerobic digestion model no. 1-based distributed parameter model of an anaerobic reactor: I. Model development. *Bioresource Technology* 99: 3665-3675.
- Penumathsa B. K. V.; Premier G. C.; Kyazze G.; Dinsdale R.; Guwy A. J.; Esteves S.; Rodríguez J. 2008. ADM1 can be applied to continuous bio-hydrogen production using a variable stoichiometry approach. *Water Research* 42: 4379-4385
- Ramirez I.; Volcke E. I. P.; Rajinikanth R.; Steyer J. P. 2009. Modeling microbial diversity in anaerobic digestion through an extended ADM1 model. *Water Research* 43: 2787-2800.
- Rosen C.; Vrecko D.; Gernaey K. V.; Pons M. N.; Jeppsson U. 2006. Implementing ADM1 for plant-wide benchmark simulations in Matlab/Simulink. *Water Science and Technology* 54(4): 11-19.
- Silva F.; Nadais H.; Prates A.; Arroja L.; Capela I. 2009. Modelling of anaerobic treatment of evaporator condensate (EC) from a sulphite pulp mill using the IWA anaerobic digestion model no. 1 (ADM1). *Chemical Engineering Journal* 148: 319-326.
- Shimada T.; Zilles J.; Raskin L.; Morgenroth E. 2007. Carbohydrate storage in anaerobic sequencing batch reactors. *Water Research* 41: 4721-4729.
- Schoen M. A.; Sperl D.; Gadermaier M.; Goberna M.; Franke-Whittle I.; Insam H.; Ablinger J.; Wett B. 2009. Population dynamics at digester overload conditions. *Bioresource Technology* 100(23): 5648-5655.
- Stafford D. A.; Hawes D. L.; Horton H. R. 1980. Methane production from waste organic matter. CRC Press, Boca Raton, FL USA. 280 p.
- Straub A. J.; Conklin A. S. Q.; Ferguson J. F.; Stensel H. D. 2006. Use of the ADM1 to investigate the effects of acetoclastic methanogen population dynamics on mesophilic digester stability. *Water Science and Technology* 54(4): 59-66.
- Tartakovsky B.; Mu, S. J.; Zeng Y.; Lou S. J.; Guiot S. R.; Wu, P. 2008. Anaerobic digestion model no. 1-based distributed parameter model of an anaerobic reactor: I. Model development. *Bioresource Technology* 99: 3676-3684.
- Vavilin V. A.; Angelidaki I. 2005. Anaerobic degradation of solid material: importance of initiation centers for methanogenesis, mixing intensity, and 2D distributed model. *Biotechnology Bioengineering*, 89(1): 113-122.
- Vertes A. A.; Inui M.; Yukawa H. 2006. Implementing biofuels on a global

scale. *Nature Biotechnology* 24(7): 761-764.

Wichern M.; Gehring T.; Fischer K.; Andrade D.; Lübken M.; Koch K.; Gronauer A.; Horn H. 2009. Monofermentation of grass silage under mesophilic conditions: Measurements and mathematical modeling

with ADM 1. *Bioresource Technology* 100: 1675-1681.

Zhao B. H.; Yue Z. B.; Ni B. J.; Mu Y.; Yu H. Q.; Harada H. 2009. Modeling anaerobic digestion of aquatic plants by rumen cultures: Cattail as an example. *Water Research* 43: 2047-2055.