

# APLICACIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DE ROEDIGER PARA LA PREDICCIÓN DEL RENDIMIENTO EN LA DIGESTIÓN ANAEROBIA DE LAS AGUAS RESIDUALES DEL CAFÉ

## APPLICATION OF THE ROEDIGER MATHEMATICAL MODEL FOR THE PREDICTION OF PERFORMANCE IN THE ANAEROBIC DIGESTION OF COFFEE WASTEWATER

Diego Armando Yugla Lema <sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Unidad Educativa “Ramón Barba Naranjo” cantón Latacunga, provincia Cotopaxi, Ecuador. ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-7264-546X>. Correo: [diego.yugla@educacion.gob.ec](mailto:diego.yugla@educacion.gob.ec)

\* Autor para correspondencia: [diego.yugla@educacion.gob.ec](mailto:diego.yugla@educacion.gob.ec)

### Resumen

En la investigación que dio origen al presente artículo se planteó como objetivo: establecer un mecanismo de medición objetiva para la predicción del rendimiento de metano en la digestión anaerobia de las aguas residuales del café. Desde un enfoque cuantitativo se utiliza el modelo de Roediger, método de solución, el análisis de error, criterios de optimización y la comparación entre valores experimentales y predichos, arribando a las siguientes conclusiones: Los métodos de ajuste aplicados en la presente investigación generan resultados similares entre sí, los cuales guardan relación con los rendimientos experimentales de la digestión anaerobia de las aguas residuales del café. Se aprecia gráficamente que las isotermas siguen la misma tendencia y se puede corroborar mediante el análisis de varianza (ANOVA) que la significancia entre el promedio de los estadígrafos empleados para evaluar la predicción del modelo de Roediger es relativamente alta. Por tanto, el modelo de Roediger se constituye en una herramienta matemática que puede predecir el rendimiento de metano de las aguas residuales del café en un rango estadísticamente significativo, bajo las condiciones y requisitos experimentales detallados en este trabajo. Mediante el análisis de varianza ANOVA se demostró que las variables que componen el modelo de Roediger, como el rendimiento máximo de metano y constante cinética no guardan relación estadísticamente significativa, puesto que el valor de probabilidad es superior a 0,05. El presente estudio aporta a la comunidad científica y establece una base para realizar estudios que evalúen otros modelos matemáticos con variables que caracterizan el desarrollo, inhibición y productividad de este proceso bioquímico.

**Palabras clave:** métodos matemáticos; predicción del rendimiento; digestión anaerobia; aguas residuales del café

## Abstract

*The objective of the research that gave rise to this article was to establish an objective measurement mechanism for the prediction of methane yield in the anaerobic digestion of coffee wastewater. From a quantitative approach, the Roediger model, solution method, error analysis, optimization criteria and comparison between experimental and predicted values are used, arriving at the following conclusions: The adjustment methods applied in the present investigation generate similar results. each other, which are related to the experimental performances of the anaerobic digestion of coffee wastewater. It can be seen graphically that the isotherms follow the same trend and it can be corroborated through the analysis of variance (ANOVA) that the significance between the average of the statisticians used to evaluate the prediction of the Roediger model is relatively high. Therefore, the Roediger model constitutes a mathematical tool that can predict the methane yield of coffee wastewater in a statistically significant range, under the experimental conditions and requirements detailed in this work. Through the ANOVA analysis of variance, it was shown that the variables that make up the Roediger model, such as the maximum methane yield and kinetic constant, do not have a statistically significant relationship, since the probability value is greater than 0.05. The present study contributes to the scientific community and establishes a basis to carry out studies that evaluate other mathematical models with variables that characterize the development, inhibition and productivity of this biochemical process.*

**Keywords:** *mathematical methods; performance prediction; anaerobic digestion; coffee wastewater*

**Fecha de recibido:** 12/01/2024

**Fecha de aceptado:** 20/03/2024

**Fecha de publicado:** 01/04/2024

## Introducción

En la presente investigación se pretende evaluar el rendimiento de la digestión anaerobia como vía de remediación de las aguas residuales de la industria del café. El análisis multivariable permitirá determinar la influencia de los parámetros más importantes en el desarrollo del tratamiento biológico (digestión anaeróbica) a través del modelo matemático de Roediger. Este modelo considera entre sus variables, el rendimiento máximo de metano, el cual se obtiene experimentalmente, así como una constante cinética y el tiempo de operación.

En muchas ocasiones, las industrias no aplican mecanismos de remediación ambiental, debido al alto costo de operación y evaluación experimental de los tratamientos biológicos. Esto implica que no se controlen los parámetros operacionales del proceso y por lo tanto, se descarguen las aguas residuales con un bajo nivel de remoción. Esta investigación corresponde a un trabajo que permitirá determinar la eficiencia de un tratamiento medioambiental para las aguas residuales de la industria del café, lo que a su vez permite tomar decisiones para corregir la ruta del proceso en mención y de esta forma, garantizar un adecuado tratamiento. En este

sentido, el modelo matemático de primer orden o modelo de Roediger (Edeline, 1980), ha sido comprobado por su alta correlación con la digestión anaerobia de las aguas residuales.

El modelo en mención permite determinar el rendimiento de metano a partir del rendimiento máximo para el sustrato o residuo, constante cinética de primer orden ( $d^{-1}$ ) y el tiempo ( $d$ ). Por su parte, el modelo considera una ecuación de primer orden, debido a que se ha demostrado que los procesos biológicos siguen esta tendencia lineal (Edeline, 1980). Además, toma en cuenta, la constante cinética, en base a la fase biológica que realizan los microorganismos, con la finalidad de convertir la carga contaminante en un producto de valor agregado en aspectos energéticos, para su posterior aprovechamiento tecnológico en sustitución de combustibles convencionales.

Finalmente, es importante mencionar que a pesar de que existen varios modelos matemáticos empleados con la misiva de evaluar el rendimiento de la digestión anaerobia, entre ellos: Gompertz, Fitzhugh, de Función de Transferencia, Cone y Suma de errores cuadráticos (Kythreotou et al., 2014); el de primer orden (Roediger) tiene relación con el proceso biológico anaerobio en el tratamiento de aguas residuales domésticas e industriales, por consiguiente, es de gran utilidad para determinar la influencia de las múltiples variables que intervienen en la estimación de la digestión anaerobia de las aguas residuales del café instantáneo. Se planteó como Objetivo: establecer un mecanismo de medición objetiva para la predicción del rendimiento de metano en la digestión anaerobia de las aguas residuales del café.

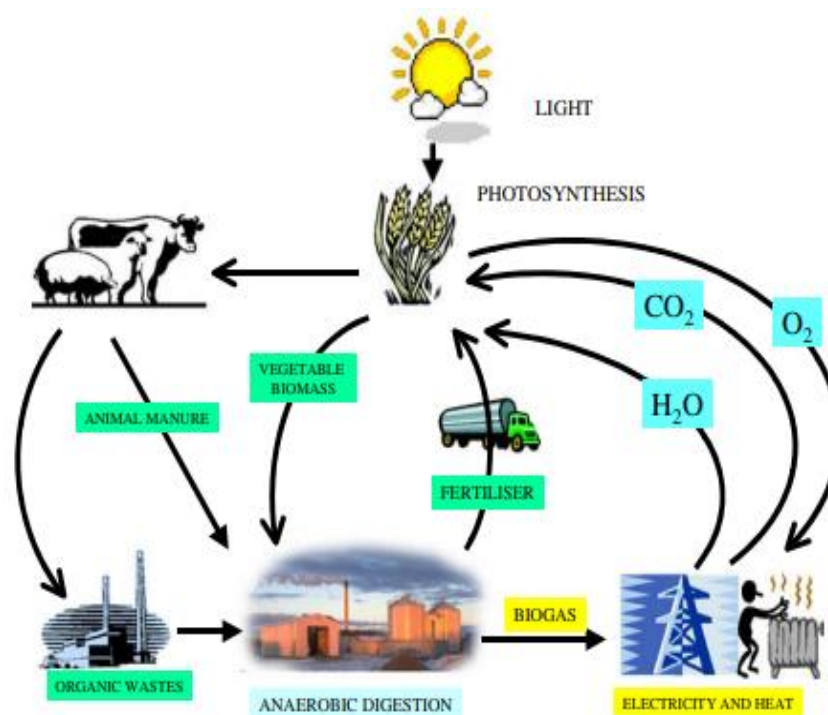
### Marco teórico

En líneas generales, la industria del café ha venido registrando un crecimiento a nivel mundial, puesto que en el año 2018 se cosecharon aproximadamente 160 millones de sacos de 60 kilogramos (kg) para satisfacer las necesidades la demanda productiva de esta materia prima. Se debe considerar según los reportes de la Organización Internacional del Café (ICO), también se menciona que la mitad de la producción mundial de café se cosecha en Suramérica (ICO, 2018). No obstante, el crecimiento económico de la industria no ha representado crecimiento de iguales proporciones en términos de cuidado ambiental y saneamiento de residuos. El Ecuador es un país con alta producción de café, de modo que las industrias procesadoras de café generan en promedio 41244087 m<sup>3</sup> de aguas residuales por año de producción (Foresti et al., 2006). Las aguas residuales son el principal residuo de esta industria, por sus características físicas, químicas y biológicas. Por cada kilogramo de café industrializado, se genera 115 g DQO en las aguas residuales de la industria del sector cafetero (Rodríguez et al., 2000).

La digestión anaeróbica es un proceso biológico que se compone de cuatro fases que tienen como finalidad convertir la materia orgánica en metano. Como la mayoría de los residuos contienen altas cantidades de materia orgánica, este procedimiento bioquímico puede ser empleado como una vía de remediación para remover la carga contaminante y a la vez generar un producto químico con valor agregado (Chynoweth et al., 2001; Holm-Nielsen et al., 2009). A diferencia de otras tecnologías ambientalmente amigables, como los procesos de oxidación química, digestión aerobia, fotocatalisis, la digestión anaerobia presenta múltiples ventajas, fundamentadas en los altos niveles de remoción de la materia orgánica y la bioproducción de metano, compuesto químico que normalmente es producido a partir de la destilación del petróleo (Gujer & Zehnder, 1983).

Las etapas de la digestión anaerobia son: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis y cabe indicar que la velocidad de reacción depende del tipo de sustrato o residual. En residuos sólidos la fase hidrolítica es la más compleja, por lo tanto, debe transcurrir un tiempo mayor para lograr su objetivo; mientras que, en los residuos líquidos, la etapa metanogénica es la más lenta del proceso (Holm-Nielsen et al., 2009).

La Figura 1 muestra los procesos que conllevan a la digestión anaerobia, partiendo de materia orgánica que proviene de fuentes animales, vegetales y otras formas de biomasa. Se observa que todos estos recursos son la fuente para el proceso biológico que permite generar biogás, compuesto por metano, ácido sulfhídrico y dióxido de carbono. El metano puede ser aprovechado mediante un proceso fisicoquímico en energía eléctrica. El ciclo previamente expuesto fundamenta, además, otros procesos simbióticos de la naturaleza, por lo tanto, se comprueba que la digestión anaerobia es un proceso natural que puede ser potencialmente aprovechado por el ser humano, en aras de reducir la carga contaminante de los recursos generados por la huella antropológica.



**Figura 1.** Representación gráfica del ciclo biológico de la digestión anaerobia (Holm-Nielsen et al., 2009).

- Hidrólisis. En esta etapa, las macromoléculas son convertidas en sustancias con una estructura más sencilla, de manera que puedan ser procesadas y digeridas por los elementos biológicos que prosiguen según el conjunto de reacciones que componen este procedimiento. Bajo condiciones normales, es la etapa limitante del proceso.
- Acidogénesis. Los microorganismos que se encargan de convertir las moléculas producidas en la fase anterior, son resistentes a condiciones extremas de supervivencia; por lo tanto, resisten las diversas

características del residuo suministrado. Los productos principales de la acidogénesis son los ácidos grasos volátiles, que incluyen: ácido propiónico, ácido butírico y ácido acético.

- Acetogénesis. Los ácidos grasos volátiles obtenidos en la etapa anterior son convertidos en ácido acético, dióxido de carbono e hidrógeno molecular. Evidentemente, el proceso acetogénico se lleva a cabo en presencia de varias sustancias con alta acidez.
- Metanogénesis. El ácido acético es transformado en metano y dióxido de carbono debido a la actividad biológica de los microorganismos. Como se menciona anteriormente, en el caso de los residuos líquidos, esta etapa es considerada limitante para los residuos en estado líquido (Chynoweth et al., 2001).

### Materiales y métodos

Para realizar la modelación del proceso de digestión anaerobia de las aguas residuales del café se utilizaron los resultados experimentales del trabajo de investigación de Morales & Vera (2018). En este trabajo, se evaluaron los rendimientos de metano para diferentes cargas orgánicas en reactores anaerobios tipo filtro que operaban a temperaturas termofílicas (55 °C). La investigación realizada por Morales & Vera (2018) tuvo como objetivo determinar el rendimiento de metano de las aguas residuales de la industria del café en función de la concentración de carga orgánica a partir de un sustrato sintético.

El sustrato sintético se preparó a base de café insoluble, comercialmente conocido como café para filtrar, el cual es un producto muy consumido a nivel mundial; cabe indicar que este producto genera un medio acuoso que tiene propiedades físico-químicas, entre ellas el pH, concentración de la carga orgánica (demanda química de oxígeno) similares a la del agua residual de la industria del café. Por lo tanto, debido a la escasa disponibilidad y acceso a los residuos industriales, los autores del proyecto mencionado decidieron evaluar el proceso experimental mediante agua residual simulada.

De acuerdo con Morales & Vera, el agua residual de la industria del café tiene en promedio una carga contaminante (*DQO*) de 7500 mg/L. Por otra parte, los reactores empleados para tratar el residuo operaron con un termostato, que permitió mantener constante la temperatura. Además, estos reactores contaron con un diseño tipo filtro anaerobio, con impelentes en la zona media para mantener y concentrar la biomasa o microorganismos metanogénicos, capaces de bioconvertir un residuo (sustrato) en productos con valor agregado en la industria energética.

**Tabla 1.** Datos experimentales del rendimiento de metano a partir de las aguas residuales del café. Fuente: Tomado de Morales & Vera (2018).

Tiempo (días)	Carga orgánica (g <i>DQO</i> /L* día)	Rendimiento de metano (Y: mL CH <sub>4</sub> /g <i>DQO</i> )	Rendimiento de metano - acumulado
1	0,72	215,52	215,52
2	0,72	224,98	440,5
3	0,72	244,48	684,98
4	0,72	268	952,98
5	0,72	227,31	1180,29
6	0,72	231,9	1412,19
7	0,72	204,96	1617,15
8	0,72	257,91	1875,06



9	0,72	234	2109,06
10	0,72	221,73	2330,73

En la Tabla 1 se muestran los resultados obtenidos en la investigación de Morales y Vera (2018), en la que se operaron tres diferentes cargas orgánicas, no obstante, la carga que generó resultados más estables y permitió experimentar durante un periodo más regular y extenso fue con 0,72 g  $DQO/L$ \* día. Es por esta razón que la modelación y posterior evaluación del modelo se la realizará a partir de los rendimientos experimentales obtenidos con la carga previamente mencionada. La columna de rendimiento de metano acumulado equivale a la sumatoria progresiva de los rendimientos calculados diariamente.

Modelo de Roediger. El modelo exponencial de primer orden ha sido empleado en la modelación de la digestión anaerobia y además permitió determinar la influencia de variables como rendimiento máximo de metano, constante cinética que a su vez dependen de parámetros como la demanda química de oxígeno (indicador de la cantidad de carga contaminante), volumen de reactor y tiempo de operación todo esto para las condiciones termodinámicas.

$$Y_{CH_4} = Y_{max}(1 - e^{-k_0 t})$$

Donde las variables de esta fórmula representan:

- Rendimiento de metano:  $Y_{CH_4}$  (Volumen (L) de  $CH_4$ /  $DQO$  \* día)
- Demanda química de oxígeno:  $DQO$  (mg/L)
- e: función exponencial
- Constante cinética:  $k_0$  (día<sup>-1</sup>)
- Tiempo:  $t$  (día)

Método de solución. Se empleó la herramienta del paquete de Microsoft Excel, Solver. Por tanto, el generador de datos utilizado fue el algoritmo del método de solución GRG nonlinear, el cual se basa en diversos factores o variables que son calculados mediante iteraciones numéricas con restricciones o condiciones que deben cumplirse. Este complemento permitió determinar las variables del modelo de Roediger que son evaluadas en la presente investigación. Se determinaron el rendimiento máximo de metano y la constante cinética a partir del método exponencial de primer orden (Roediger) y fueron evaluados mediante 11 estadígrafos para finalmente relacionar su influencia en el valor predicho mediante la modelación matemática.

Análisis de error. Los estadígrafos son indicadores que permiten determinar un valor numérico que representa a la población o la muestra de estudio. En la presente investigación se utilizaron los siguientes estadígrafos para ajustar el modelo de Roediger en la predicción del rendimiento de metano producido en la digestión anaerobia de las aguas residuales del café. Ayawei et al. (2017) proponen una revisión general de las isothermas de adsorción y sus aplicaciones en otros procesos de remediación ambiental, así mismo se expone el uso de la regresión lineal, regresión no lineal y las funciones de error para un análisis óptimo de los datos. Entre las funciones de error para el análisis de datos propuestas por Ayawei et al. (2017) se emplearon las siguientes expresiones matemáticas, que permitieron validar el modelo de Roediger.

- Suma de los errores cuadráticos (ERRSQ)

$$ERRSQ = \sum_{i=1}^n (Y_{calci} - Y_{exi})^2$$

Donde las variables de esta fórmula son:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

- Función fraccional del error híbrida

$$HYBRID = \frac{100}{n-p} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{(Y_{exi} - Y_{calci})^2}{(Y_{exi})} \right]$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

$p$ : número de parámetros

- Error relativo promedio (ARE)

$$ARE(\%) = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{Y_{calci} - Y_{exi}}{(Y_{exi})} \right]$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

- Desviación estándar porcentual de Marquadt (MPSD)

$$MPSD = \sqrt{\frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n \left[ \frac{(Y_{exi} - Y_{calci})^2}{Y_{exi}} \right]}$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

$p$ : número de parámetros

- Suma del error absoluto (EABS)

$$EABS = \sum_i^n |Y_{exi} - Y_{calci}|$$

Donde:

$Y_{calci}$ : Y calculado "i"

$Y_{exi}$ : Y experimental "i"

i: elementos

n: número de datos

- Raíz media del error cuadrado relativo (RMSE)

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_i^n (Y_{calci} - Y_{exi})^2}{n}}$$

Donde:

$Y_{calci}$ : Y calculado "i"

$Y_{exi}$ : Y experimental "i"

i: elementos

n: número de datos

- Eficiencia del modelo (ME)

$$ME = \frac{\sum_i^n (Y_{exi} - \overline{Y_{ex}})^2 - \sum_i^n (Y_{calci} - Y_{exi})^2}{\sum_i^n (Y_{exi} - \overline{Y_{ex}})^2}$$

Donde:

$Y_{calci}$ : Y calculado "i"

$Y_{exi}$ : Y experimental "i"

$Y_{ex}$ : Y experimental

i: elementos

n: número de datos

- Coeficiente de masa residual (CRM)

$$CRM = \frac{\sum_i^n Y_{exi} - \sum_i^n Y_{calci}}{\sum_i^n Y_{exi}}$$

Donde:

$Y_{calci}$ : Y calculado "i"

$Y_{exi}$ : Y experimental "i"

i: elementos

n: número de datos

- Suma del error residual cuadrado (SRSE)



$$SRSE = \sum_i^n \left( \frac{Y_{calci} - Y_{exi}}{Y_{exi}} \right)^2$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

- Coeficiente de determinación ( $R^2$ )

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_i^n (Y_{calci} - Y_{exi})^2}{\sum_i^n (Y_{calci} - \bar{Y}_{ex})^2}$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado "i"

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental "i"

$Y_{ex}$ :  $Y$  experimental

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

- Prueba de ajuste no lineal Chi-Cuadrada ( $\chi^2$ )

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(Y_{calci} - Y_{exi})^2}{Y_{ex}}$$

Donde:

$Y_{calci}$ :  $Y$  calculado

$Y_{exi}$ :  $Y$  experimental

$i$ : elementos

$n$ : número de datos

$p$ : número de parámetros

### Criterios de optimización

Los estadígrafos fueron ajustados mediante la optimización de las constantes del modelo. La teoría de optimización clásica o programación matemática se fundamenta en un conjunto de resultados y métodos analíticos y numéricos enfocados a encontrar e identificar el mejor candidato de entre una base de alternativas, sin la necesidad de enumerar y evaluar explícitamente todas las demás alternativas (Peressini et al., 1988). Es por esta razón que una problemática de optimización es, también una problemática de decisión (Peressini et al., 1988).

Un problema de optimización consiste en la búsqueda de valores para unas determinadas variables (variables de decisión) de manera que, cumpliendo una serie de requisitos reflejados a partir de ecuaciones e inecuaciones algebraicas (restricciones) que predisponen la elección de los valores de las variables de decisión, proporcionan el mejor valor posible para una función (función objetivo) que es utilizada para medir el rendimiento de metano en la digestión anaerobia de las aguas residuales de la industria del café a partir de

datos experimentales generados en pruebas de laboratorio. En la Tabla 2 se muestran los criterios de optimización definidos para cada estadígrafo. Se resaltan los 11 estadígrafos empleados y el respectivo criterio de optimización para cada uno de ellos.

**Tabla 2. Criterios de optimización**

Estadígrafo	Optimización
<i>SEC</i>	Minimización
<i>Hybrid</i>	Minimización
<i>ARE (%)</i>	Minimización
<i>MPSD</i>	Minimización
<i>EABS</i>	Minimización
<i>RMSE</i>	Minimización
<i>ME</i>	Maximización
<i>CRM</i>	Cero
<i>SRSE</i>	Minimización
$R^2$	Maximización
$\chi^2$	Minimización

Comparación entre valores experimentales y predichos. La validación consiste en estudiar si las hipótesis básicas del modelo contradicen o no, los datos observados. En este sentido, el análisis de varianza (ANOVA) se utilizó para comparar las medias del rendimiento de metano experimental y rendimiento predicho mediante el modelo matemático (Pérez-López, 2015). El ANOVA fue realizado con los datos experimentales tomados de Morales y Vera (2018) en contraste con los valores generados a partir del modelo exponencial de primer orden. Las variables del modelo de Roediger: rendimiento máximo de metano y constante cinética obtenidas para cada estadígrafo fueron promediadas. De esta forma se pudo realizar el análisis multivariante para comprobar si las variables consideradas en el modelo exponencial de primer orden (Roediger) influyen en la predicción del rendimiento de metano obtenido a partir de las aguas residuales de la industria cafetera; además, se pudo determinar la probabilidad de correlación respecto a valores experimentales.

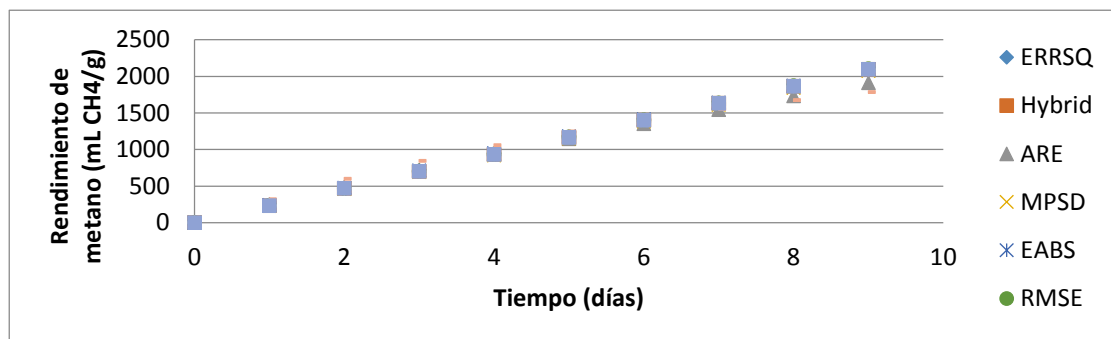
## Resultados y discusión

### Modelación matemática

La Tabla 3 expone los resultados obtenidos a partir del modelo de Roediger y los resultados experimentales para  $t$ : 9 días, puesto que en este día se realizó el corte de datos. Para cada estadígrafo se determinaron los valores de la constante cinética, rendimiento máximo de metano y rendimiento predicho de metano.

**Tabla 3.** Comparación entre los resultados obtenidos a partir del modelo y los resultados experimentales para cada estadígrafo.

Estadígrafo	Rendimiento de metano experimental ( $Y_{exp}$ )	Rendimiento de metano calculado ( $Y_{cal}$ )	Rendimiento de metano máximo ( $Y_{max}$ )	Constante cinética ( $K_o$ )
<i>ERRSQ</i>		2097,83204	84392,94741	0,002796898
<i>Hybrid</i>		2092,450266	211506,6484	0,001104704
<i>ARE(%)</i>		1910,101372	6192,101928	0,040983809
<i>MPSD</i>		2071,285517	12654723,06	1,81878E-05
<i>EABS</i>		2095,31784	32799,45438	0,007334944
<i>RMSE</i>		2101,598456	163935,7435	0,001433614
<i>ME</i>		2098,985294	103543,4705	0,002275536
<i>CRM</i>	2109,06	1782,600567	2526,87466	0,135814348
<i>SRSE</i>		2071,272842	10855696,36	2,12021E-05
$R^2$		2100,472613	122593,7817	0,001920231
$\chi^2$		2092,171092	192594,6219	0,001213613



**Figura 2.** Rendimiento de metano en función del tiempo para cada estadígrafo

La Figura 2 refleja los rendimientos de metano obtenidos a partir del modelo de Roediger para cada uno de los estadígrafos. Se observa una tendencia similar entre los diferentes índices estadísticos, no obstante, el CRM presenta mayor dispersión durante prácticamente todos los días de operación, mientras que el ARE a partir del día 5 genera resultados que no siguen la línea de tendencia general para el método exponencial de primer orden.

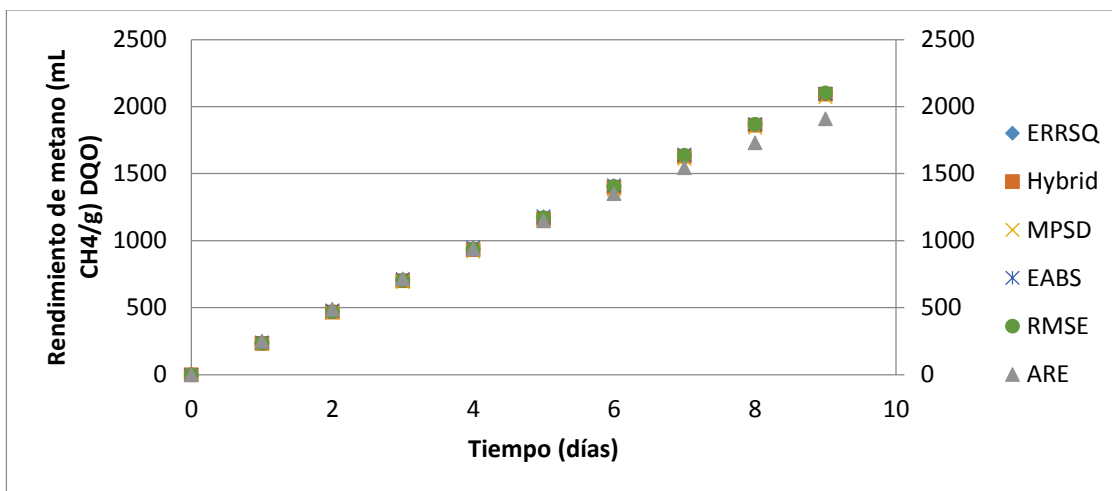


Figura 3. Rendimiento de metano en función del tiempo para 6 estadígrafos

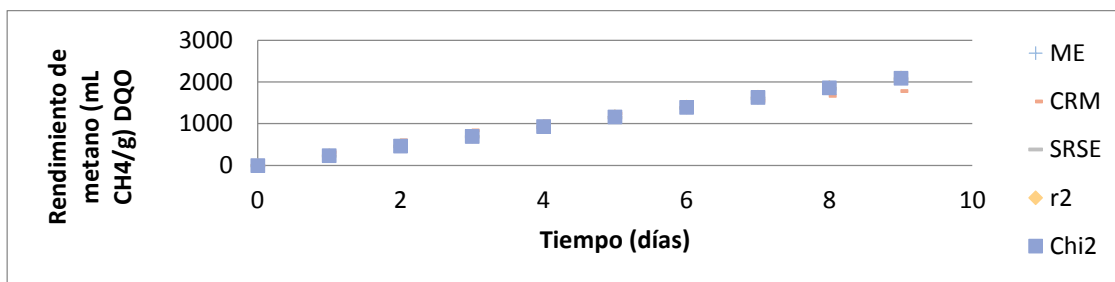


Figura 4. Rendimiento de metano en función del tiempo para 5 estadígrafos

### Diferencias entre valores observados y predichos

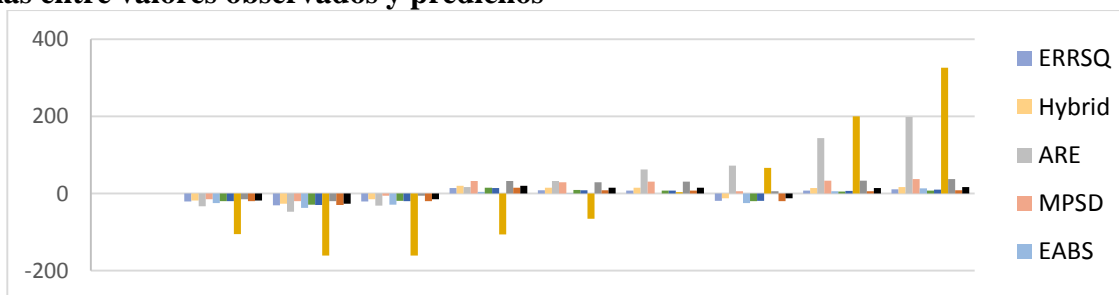
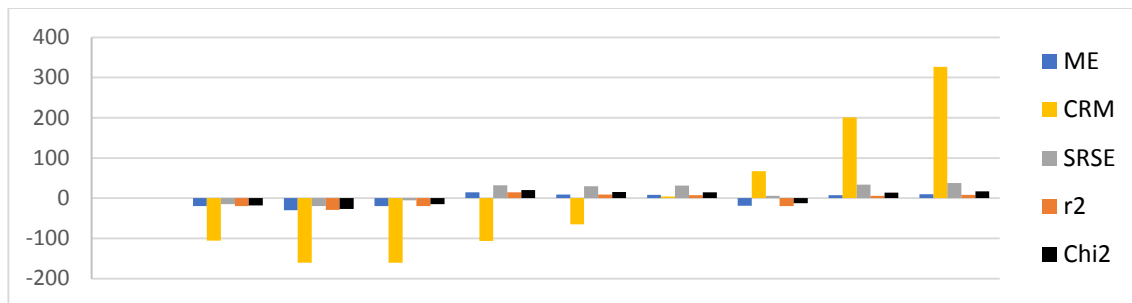
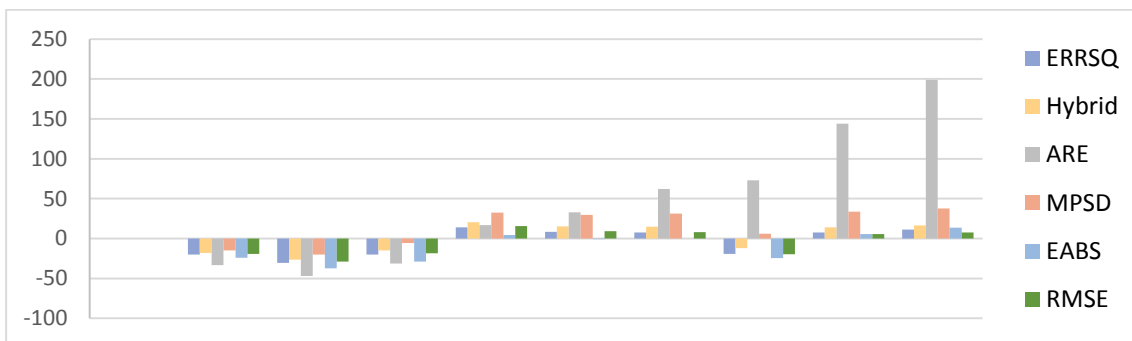


Figura 5. Diferencia entre valores observados y predichos para cada estadígrafo.

La Figura 5 muestra las diferencias entre los valores observados experimentalmente y los valores generados a partir del modelo matemático de Roediger, se observa que el estadígrafo que generó mayores diferencias fue el CRM.



**Figura 6.** Diferencia entre valores observados y predichos para 5 estadígrafos.



**Figura 7.** Diferencia entre valores observados y predichos para 6 estadígrafos.

### Criterios de optimización

Los criterios de optimización aplicados permitieron determinar los siguientes resultados. Para calificar el ajuste del modelo se determinaron los estadígrafos para analizar el error. El valor de cada uno fue determinado a través de las fórmulas planteadas en el capítulo anterior, de modo que se evaluó la relación entre la predicción y los valores reales. Para cada estadígrafo se calcularon los indicadores que permitieron concluir sobre la eficiencia, pertinencia y certeza del modelo de Roediger.

Se plantean 11 tablas con el análisis de error para cada método de ajuste (estadígrafo). En cada tabla se indica el criterio de optimización y el resultado de cada método de ajuste (análisis de error). Anteriormente se definen las fórmulas de los estadígrafos, que mediante la resolución de las mismas permitieron obtener los valores del análisis de error, para determinar la efectividad del modelo. El análisis de error se realizó contrastando los valores experimentales y calculados mediante el modelo de Roediger, de forma tal que se pudo determinar el estadígrafo que reporta mayor ajuste. En el caso del estadígrafo  $R^2$ , como se indica previamente, a medida que el valor se acerca a 1 se asocia con una mayor correlación entre las variables evaluadas. Asimismo, se indica el mecanismo de optimización (mínimo-máximo-cero) para cada estadígrafo.

#### ERRSQ

**Tabla 4.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice ERRSQ

Min	ERRSQ	2606,744549
Min	Hybrid	64,86771003
Min	ARE (%)	1,668242636

Min	<i>MPSD</i>	0,043074603
Min	<i>EABS</i>	138,795372
Min	<i>RMSE</i>	16,14541591
Max	<i>ME</i>	0,999431479
CERO	<i>CRM</i>	-0,003866035
Min	<i>SRSE</i>	0,014843372
Max	$R^2$	0,999418469
Min	$\chi^2$	5,189416802

**Hybrid**

**Tabla 5.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice *Hybrid*.

Min	<i>ERRSQ</i>	2727,855011
Min	<i>Hybrid</i>	56,41243764
Min	<i>ARE (%)</i>	1,120239112
Min	<i>MPSD</i>	0,03860035
Min	<i>EABS</i>	152,4991752
Min	<i>RMSE</i>	16,51621933
Max	<i>ME</i>	0,999405065
CERO	<i>CRM</i>	0,000960021
Min	<i>SRSE</i>	0,011919896
Max	$R^2$	0,999388296
Min	$\chi^2$	4,512995011

**ARE**

**Tabla 6.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice ARE

Min	<i>ERRSQ</i>	75173,9707
Min	<i>Hybrid</i>	607,37161
CERO	<i>ARE (%)</i>	4,78677E-06
Min	<i>MPSD</i>	0,084324248
Min	<i>EABS</i>	639,2059777
Min	<i>RMSE</i>	86,70292423
Max	<i>ME</i>	0,983604843
CERO	<i>CRM</i>	0,039715849
Min	<i>SRSE</i>	0,05688463
Max	$R^2$	0,979855515
Min	$\chi^2$	48,5897288

**MPSD**

**Tabla 7.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice MPSD

Min	<i>ERRSQ</i>	6149,935666
Min	<i>Hybrid</i>	72,17731017
Min	<i>ARE (%)</i>	-3,5828E-05
Min	<i>MPSD</i>	0,034703065
Min	<i>EABS</i>	210,9327227



Min	<i>RMSE</i>	24,79906382
Max	<i>ME</i>	0,998658722
CERO	<i>CRM</i>	0,012495675
Min	<i>SRSE</i>	0,009634422
Max	<i>R<sup>2</sup></i>	0,998593139
Min	$\chi^2$	5,774184814

**EABS**

**Tabla 8.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice EABS.

Min	<i>ERRSQ</i>	3640,151182
Min	<i>Hybrid</i>	94,54924377
Min	<i>ARE (%)</i>	2,40055176
Min	<i>MPSD</i>	0,052183668
Min	<i>EABS</i>	139,6259189
Min	<i>RMSE</i>	19,07918023
Max	<i>ME</i>	0,999206097
CERO	<i>CRM</i>	-0,00870655
Min	<i>SRSE</i>	0,021785082
Max	<i>R<sup>2</sup></i>	0,999186091
Min	$\chi^2$	7,563939501

**RMSE**

**Tabla 9.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice RMSE

Min	<i>ERRSQ</i>	2426,992243
Min	<i>Hybrid</i>	59,88138189
Min	<i>ARE (%)</i>	1,579655126
Min	<i>MPSD</i>	0,041247046
Min	<i>EABS</i>	132,7223709
Min	<i>RMSE</i>	15,5788069
Max	<i>ME</i>	0,999470682
CERO	<i>CRM</i>	-0,00384717
Min	<i>SRSE</i>	0,01361055
Max	<i>R<sup>2</sup></i>	0,999460509
Min	$\chi^2$	4,790510551

**ME**

**Tabla 10.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice ME.

Min	<i>ERRSQ</i>	2532,962969
Min	<i>Hybrid</i>	62,73645128
Min	<i>ARE (%)</i>	1,621904709
Min	<i>MPSD</i>	0,042300036
Min	<i>EABS</i>	137,0767993
Min	<i>RMSE</i>	15,91528501

Max	ME	0,99944757
CERO	CRM	-0,00372229
Min	SRSE	0,014314344
Max	R <sup>2</sup>	0,999435548
Min	χ <sup>2</sup>	5,018916103

CRM

**Tabla 11.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice CRM

Min	ERRSQ	229561,1916
Min	Hybrid	2974,253583
Min	ARE (%)	9,486552541
Min	MPSD	0,244826652
Min	EABS	1195,922675
Min	RMSE	151,512769
Max	ME	0,949933579
CERO	CRM	1,00282E-07
Min	SRSE	0,479520714
Max	R <sup>2</sup>	0,928726829
Min	χ <sup>2</sup>	237,9402867

SRSE

**Tabla 12.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice SRSE.

Min	ERRSQ	6151,733472
Min	Hybrid	72,19249893
Min	ARE (%)	-3,5826E-05
Min	MPSD	0,034706142
Min	EABS	210,9653251
Min	RMSE	24,80268831
Max	ME	0,99865833
CERO	CRM	0,012497749
Min	SRSE	0,00963613
Max	R <sup>2</sup>	0,998592711
Min	χ <sup>2</sup>	5,775399914

R<sup>2</sup>

**Tabla 13.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice R<sup>2</sup>

Min	ERRSQ	2484,432838
Min	Hybrid	61,71143087
Min	ARE (%)	1,620881636
Min	MPSD	0,041949847
Min	EABS	134,4258052
Min	RMSE	15,76208374
Max	ME	0,999458155
CERO	CRM	-0,00395912
Min	SRSE	0,014078318

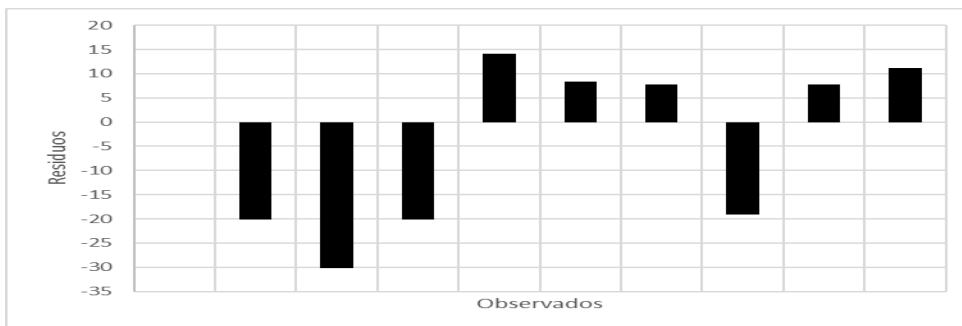
Max	$R^2$	0,999447149
Min	$\chi^2$	4,93691447

$\chi^2$

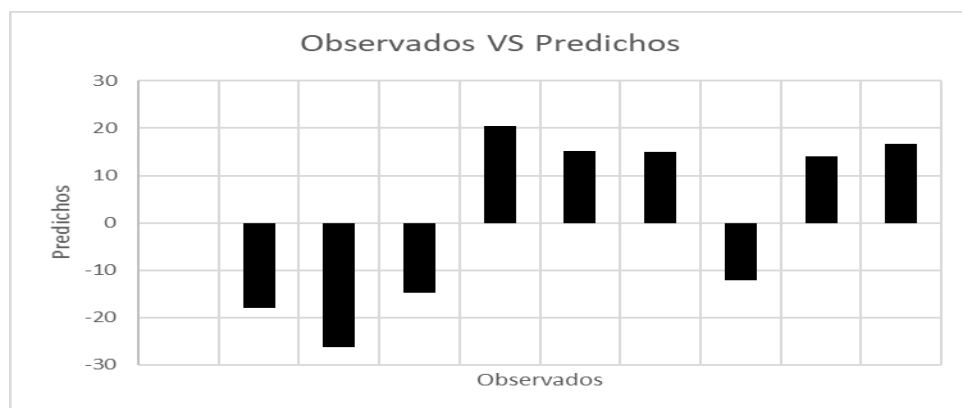
**Tabla 14.** Análisis de error en base a los criterios de optimización de los estadígrafos para el índice  $X^2$

Min	<i>ERRSQ</i>	2743,578699
Min	<i>Hybrid</i>	56,76980684
Min	<i>ARE (%)</i>	1,128200513
Min	<i>MPSD</i>	0,038744046
Min	<i>EABS</i>	152,9379223
Min	<i>RMSE</i>	16,56375169
Max	<i>ME</i>	0,999401636
CERO	<i>CRM</i>	0,000948474
Min	<i>SRSE</i>	0,012008809
Max	$R^2$	0,999384606
Min	$\chi^2$	4,541584547

Al comparar los valores predichos y observados según cada método de ajuste surgen las siguientes figuras.



**Figura 8.** ERRSQ



**Figura 9.** Hybrid



Figura 10. ARE



Figura 11. MPSD

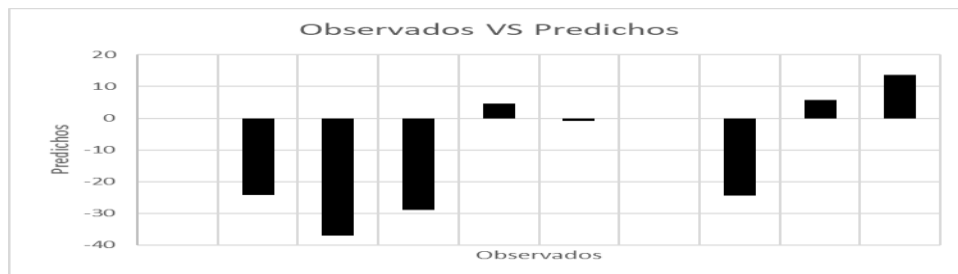


Figura 12. EABS

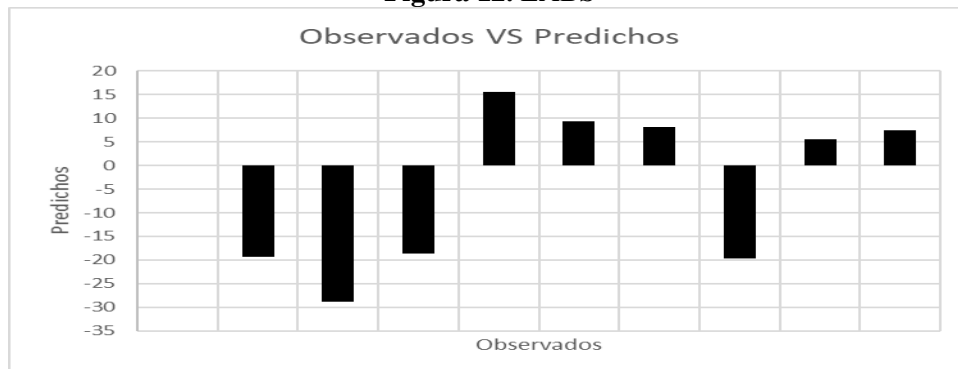
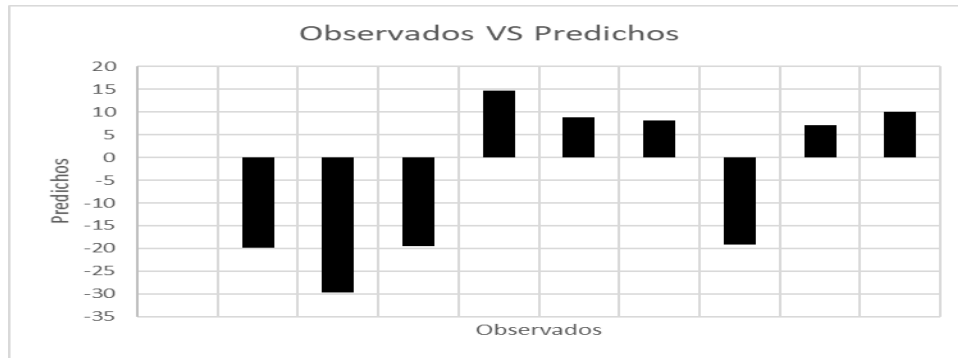
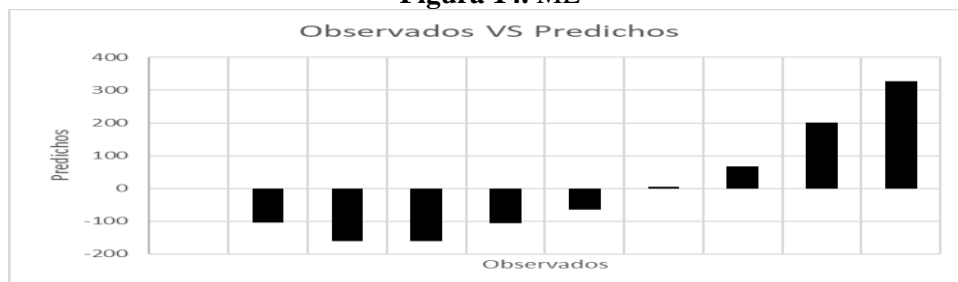


Figura 13. RMSE



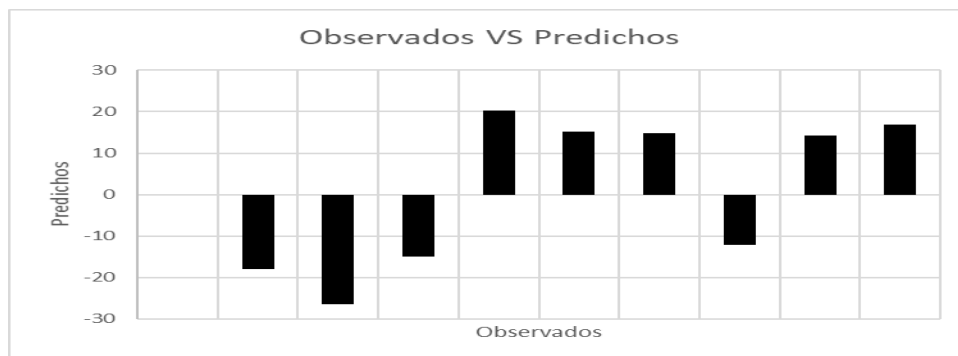
**Figura 14. ME**



**Figura 15. CRM**



**Figura 16. SRSE**



**Figura 17. Chi**

**Tabla 15.** Análisis de error de algunos métodos de ajuste.

Método de ajuste	% Error absoluto	R <sup>2</sup>
ERRSQ	1,66824264	0,99941847
ARE	4,7868E-06	0,97985552
EABS	2,40055176	0,99918609
ME	1,62190471	0,99943555
R <sup>2</sup>	1,62088164	0,99944715
CRM	9,48655254	0,92872683

### Análisis de varianza (ANOVA)

En este apartado se exponen los resultados del análisis de varianza mediante ANOVA, el cual permitió comparar el rendimiento de metano determinado experimentalmente y el rendimiento de metano calculado a partir del modelo de Roediger. La Tabla 16 se compone de las variables del modelo de Roediger: rendimiento máximo de metano ( $Y_{max}$ ) y la constante cinética ( $K$ ) y el rendimiento experimental ( $Y_{ex}$ ) para un período de operación de 9 días. Se determinó un valor de probabilidad que permitió concluir la correlación entre los valores predichos y experimentales.

Por su parte, en la Tabla 17 se comparan los valores de rendimiento máximo de metano y la constante cinética obtenidos mediante el modelo de Roediger, con la finalidad de determinar la influencia en el modelo de Roediger. Para analizar la dispersión entre el rendimiento de metano calculado y el rendimiento experimental se utilizó el análisis de varianza - ANOVA. Como punto de partida se plantearon las hipótesis para establecer la comparación señalada y determinar la correlación e influencia de las variables en mención, en la predicción del rendimiento de metano en la digestión anaerobia. A partir de este análisis se evalúa la relación estadística entre los datos observados y calculados a partir del modelo matemático.

En la Tabla 16 se determinó el rendimiento de metano promedio ( $mL/gDQO$ ) y al comparar con su equivalente experimental se estimó la probabilidad de la relación estadística entre las variables.

**Tabla 16.** ANOVA entre el rendimiento calculado promedio y rendimiento experimental

Tiempo (días)	$Y_{max}$ prom	$K$ prom	$Y_{calc}$ prom (mL/gDQO)	$Y_{ex}$ (mL/gDQO)	Valor de probabilidad
0	2220955,0	0,0177197	0	0	0,000149445
1	1	4	39008,107	215,52	
2			77331,0888	440,5	
3			114980,979	684,98	
4			151969,598	952,98	
5			188308,562	1180,29	
6			224009,281	1412,19	
7			259082,964	1617,15	
8			293540,625	1875,06	
9			327393,084	2109,06	



Por su parte, la Tabla 17 refleja la comparación entre el rendimiento máximo de metano y la constante cinética, para determinar el cumplimiento del último objetivo de la presente investigación, que consistió en determinar la correlación entre las variables del modelo de Roediger. En el análisis de varianza, los valores de probabilidad o significancia inferiores a 0,05 aprueban la hipótesis, mientras que valores superiores a este valor, niegan la hipótesis planteada.

**Tabla 17.** ANOVA entre el Rendimiento máximo y la constante cinética.

<i>Y max</i>	<i>k</i>	Valor de probabilidad
84392,9474	0,0027969	
211506,648	0,0011047	
6192,10193	0,04098381	
12654723,1	1,8188E-05	
32799,4544	0,00733494	
163935,743	0,00143361	0,13519826
103543,47	0,00227554	
2526,87466	0,13581435	
10855696,4	2,1202E-05	
122593,782	0,00192023	
192594,622	0,00121361	

## Discusión

Modelado matemático. Los valores obtenidos a través del modelo de Roediger tienen relación estadísticamente significativa con los resultados experimentales, puesto que gráficamente se observa que siguen tendencias similares. Entre los 11 estadígrafos utilizados como análisis de errores en la modelación, se detecta que el índice *CRM* y *ARE* presentan valores calculados con mayor dispersión respecto a los valores observados experimentalmente (figura 5). En la tabla 15 se indican los principales análisis de errores de algunos de los métodos de ajuste; se evidencia que el *CRM* tiene el mayor porcentaje de error, por su parte el estadígrafo de correlación/determinación  $R^2$  presenta los mejores resultados en función de los análisis de errores realizados.

A pesar de las diferencias detectadas, todos los estadígrafos sugieren que el método de Roediger permite predecir valores de rendimiento de metano que no presentan diferencias estadísticamente significativas con respecto a los valores experimentales. En otros estudios se ha determinado el rendimiento máximo de metano mediante regresión no lineal de mínimos cuadrados y el método de Gompertz modificado para predecir el rendimiento de metano en la co-digestión anaerobia de los residuos de matadero, estiércol, residuos sólidos municipales (Pagés-Díaz et al., 2013). En este trabajo se ajustó un modelo de tipo polinomial, debido a que el proceso de remediación fue aplicado sobre una combinación de sustratos y por lo tanto, son fundamentales aquellos aspectos como la sinergia entre cada uno de los sustratos presentes en la mezcla.

Por otra parte, existen modelos más complejos que incluyen una etapa hidrolítica enzimática y cuatro fases bacterianas, considera hasta 12 sustancias químicas. El modelo se basa en la inhibición del amoníaco y considera los cambios en el pH y temperatura para simular con precisión la concentración de amoníaco libre.

Este modelo se ha aplicado para la simulación de la digestión del estiércol de ganado en reactores de tanque con agitación continua (*CSTR*), y los resultados se comparan favorablemente con los datos experimentales (Angelidaki et al., 1993).

Se concluye que la mayoría de estudios realizados hasta el momento han aplicado modelos matemáticos rigurosos, debido a la composición del residuo o sustrato, puesto que los desechos sólidos, generalmente están compuestos de varios residuos que actúan independientemente durante la digestión anaerobia y por lo tanto pueden ocasionar antagonismo en el proceso de remediación ambiental. Sin embargo, en la presente investigación se demostró que, para residuos de composición definida, como el caso de las aguas residuales, resulta fiable realizar la predicción del rendimiento de metano mediante el modelo exponencial de primer orden de Roediger.

**Análisis de Varianza.** Para comparar los rendimientos experimentales y los rendimientos calculados, se procedió a determinar los valores promedio de la constante cinética del modelo. Estos valores promedio fueron calculados a partir de los valores generados para cada estadígrafo del método de ajuste. La tabla 16 señala que la probabilidad para el ANOVA es 0,000149445 y considerando un 95% de confianza, esta probabilidad es menor que 0,05; por tanto, se concluye que existe relación estadísticamente significativa entre el rendimiento de metano basado en la experiencia y el rendimiento de metano predicho mediante modelación matemática. En este sentido, otros modelos han probado ser válidos para la predicción del rendimiento de metano en la digestión anaerobia, entre ellos el modelo estructurado *ADMI*. Este ajuste simula los principales procesos asociados a la conversión de sustratos orgánicos complejos en productos como metano, dióxido de carbono y particularmente ha sido validado en el procesamiento de desechos orgánicos y aguas residuales industriales (Yu et al., 2013).

Por otra parte, la comparación entre las variables rendimiento máximo de metano y constante cinética resultó tener una baja relación estadística, puesto que su probabilidad (0,13519826) es superior a 0,05. Evidentemente, estas no son las únicas variables que inciden en el desarrollo de la digestión anaerobia, puesto que factores como la inhibición o efecto recalcitrante de componentes intrínsecos o bien en el sustrato o generados durante las etapas bioquímicas del proceso anaeróbico, son fundamentales en la modelación y simulación. Además, aspectos fenomenológicos relacionados con el tipo de flujo, transferencia de masa y energía, diseño del reactor, características físico-químicas del sustrato como color, sólidos suspendidos, sólidos totales han probado su influencia desde la perspectiva predictiva como experimental y se observan diferencias respecto a otros trabajos de modelación, debido a razones asociadas con el diseño experimental, puesto que generalmente, este tipo de estudios se realiza a partir de datos obtenidos a escala batch o discontinua (Parker, 2005); sin embargo, los datos empleados en la presente investigación corresponden a un proceso anaerobio de régimen continuo.

## Conclusiones

Los métodos de ajuste aplicados en la presente investigación generan resultados similares entre sí, los cuales guardan relación con los rendimientos experimentales de la digestión anaerobia de las aguas residuales del café. Se aprecia gráficamente que las isotermas siguen la misma tendencia y se puede corroborar mediante el análisis de varianza (ANOVA) que la significancia entre el promedio de los estadígrafos empleados para evaluar la predicción del modelo de Roediger es relativamente alta. Por tanto, el modelo de Roediger se

constituye en una herramienta matemática que puede predecir el rendimiento de metano de las aguas residuales del café en un rango estadísticamente significativo, bajo las condiciones y requisitos experimentales detallados en este trabajo.

Mediante el análisis de varianza ANOVA se demostró que las variables que componen el modelo de Roediger, como el rendimiento máximo de metano y constante cinética no guardan relación estadísticamente significativa, puesto que el valor de probabilidad es superior a 0,05.

El tratamiento de las aguas residuales del café se ha realizado tradicionalmente mediante tecnologías aerobias, filtros y reactores oxidativos; por tanto, son escasos los estudios de digestión anaerobia aplicado sobre este residual. Por esta razón no se reportan estudios de modelado matemático y simulación del proceso de digestión anaerobia de las aguas residuales del café; por ende, el presente estudio aporta a la comunidad científica y establece una base para realizar estudios que evalúen otros modelos matemáticos con variables que caracterizan el desarrollo, inhibición y productividad de este proceso bioquímico.

### Referencias

- Angelidaki, I., Ellegaard, L., & Ahring, B. K. (1993). A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition. *Biotechnology and bioengineering*, 42(2), 159-166. <https://doi.org/10.1002/bit.260420203>
- Angelidaki, I., Ellegaard, L., & Ahring, B. K. (1999). A comprehensive model of anaerobic bioconversion of complex substrates to biogas. *Biotechnology and bioengineering*, 63(3), 363-372. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-0290\(19990505\)63:3<363::AID-BIT13>3.0.CO;2-Z](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0290(19990505)63:3<363::AID-BIT13>3.0.CO;2-Z)
- Ayawei, N., Ebelegi, A. N., & Wankasi, D. (2017). Modelling and interpretation of adsorption isotherms. *Journal of Chemistry*, 2017. <https://doi.org/10.1155/2017/3039817>
- Chynoweth, D. P., Owens, J. M., & Legrand, R. (2001). Renewable methane from anaerobic digestion of biomass. *Renewable energy*, 22(1-3), 1-8. [https://doi.org/10.1016/S0960-1481\(00\)00019-7](https://doi.org/10.1016/S0960-1481(00)00019-7)
- Edeline, F. (1980). *L'epuration biologique des eaux residuales. Théorie et technologie*. Belgium: Cebdic-Liege.
- Gujer, W., & Zehnder, A. J. (1983). Conversion processes in anaerobic digestion. *Water science and technology*, 15(8-9), 127-167. <https://doi.org/10.2166/wst.1983.0164>
- Kythreotou, N., Florides, G., & Tassou, S. A. (2014). A review of simple to scientific models for anaerobic digestion. *Renewable Energy*, 71, 701-714. doi: 10.1016/j.renene.2014.05.055
- Morales, C., Rivadeneira, S., & García, S. (2018). Digestión anaerobia de las aguas residuales de la industria del café instantáneo. *Revista ESPAMCIENCIA*, 9(1), 23-32.
- Morales, C & Vera, J. (2018). Producción de metano a partir de las aguas residuales generadas en la industria del café instantáneo en régimen termofílico continuo con presencia de taninos. Tesis de Pregrado: Universidad Técnica de Manabí.
- Parker, W. J. (2005). Application of the ADM1 model to advanced anaerobic digestion. *Bioresource*

*technology*, 96(16), 1832-1842.

- Pagés-Díaz, J., Pereda-Reyes, I., Sanz, J. L., Lundin, M., Taherzadeh, M. J., & Horváth, I. S. (2018). A comparison of process performance during the anaerobic mono-and co-digestion of slaughterhouse waste through different operational modes. *Journal of Environmental Sciences*, 64, 149-156. doi: 10.1016/j.jes.2017.06.004
- Peressini, A. L., Sullivan, F. E., & Uhl, J. J. (1988). *The mathematics of nonlinear programming* (pp. 10-13). New York: Springer-Verlag.
- Pérez-López, C. (2005). *Métodos estadísticos avanzados con SPSS*. Thompson. Madrid.
- Rodríguez, P., Pérez, S., and Fernández, B. (2000). Study of the anaerobic biodegradability of the wastewater during wet processing of coffee. *Interciencia*. 25(8): 386-390.
- Yu, L., Wensel, P. C., Ma, J., & Chen, S. (2013). Mathematical modeling in anaerobic digestion (AD). *J Bioremed Biodeg S* 4(003). doi:10.4172/2155- 6199.S4-003