Metodología para calcular la producción de metano cuando se mide el potencial bioquímico de metano utilizando el método basado en la densidad del biogás*

> Sasha D.Hafner, Camilla G. Justesen, Rasmus Thorsen, Sergi Astals, Christof Holliger, Konrad Koch, and Sören Weinrich sasha.hafner@eng.au.dk

> > August 26, 2020

Document number 204. Versión en español 1.0. Este documento forma parte de una serie de documentos dedicados a la estandarización de los ensayos de medición del potencial bioquímico de metano. †

1 Introducción

El método para medir el potencial bioquímico de metano utilizando la densidad de biogás (GD-BMP del inglés gas-density biochemical methane potential) utiliza la pérdida de masa y el volumen de biogás venteado de uno o más intervalos para determinar la densidad del biogás y, con ello, su composición. Una vez calculada la densidad del biogás, la producción de CH₄ se puede calcular con el volumen de biogás generado o con la pérdida de masa de la botella. Este

^{*}Citación recomendada: Hafner, S.D.; Justesen, C.G.; Thorsen, R.; Astals, S.; Holliger, C.; Koch, K.;, Weinrich, S., Calculation of methane production from gas density-based measurements. Standard BMP Methods document 204, version 1.5. Available online: https://www.dbfz.de/en/BMP (accessed on April 19, 2020).

En https://www.dbfz.de/en/projects/bmp/methods encontraréis un documento BibTeX para importarlo al gestor de referencias.

Este documento es una traducción al español del documento original en inglés, en caso de duda el documento en inglés prevalece sobre esta traducción.

[†]Para más información y otros documentos visite https://www.dbfz.de/en/BMP. Para ver el historial de versiones y proponer cambios visite https://github.com/sashahafner/BMP-methods.

documento explica detallada los cálculos para el método GD-BMP e incluye un ejemplo.

2 Metodología para calcular la producción de metano

La ecuación (1) calcula la densidad del biogás $(d_b, g/mL)$ utilizando de la pérdida de masa $(\Delta m_b, g)$ y el volumen de biogás en condiciones estándar $(0 \, ^{\circ}C, 101, 325 \, \text{kPa}) \, (V_b, \, \text{mL})$, corrigiendo por la cantidad de vapor de agua en el biogás $(m_{H_2O}, g/mL)$.

$$d_b = \frac{\Delta m_b}{V_b} - m_{H_2O} \tag{1}$$

El volumen de biogás producido en condiciones estándar (V_{std}) es el volumen de biogás venteado de la botella (V_{meas}) una vez se ha corregido teniendo en cuenta el vapor de agua, la temperatura y la presión como muestra la ecuación (2).

$$V_{std} = V_{meas} \cdot \frac{(p_{meas} - p_{H_2O})}{101,325 \,\text{kPa}} \cdot \frac{273,15 \,\text{K}}{(T_{meas} + 273,15)}$$
(2)

donde p_{meas} es la presión del biogás cuando se mide el volumen de biogás (aprox. presión atmosférica, kPa), T_{meas} es la temperatura en °C cuando se mide el volumen de biogás, $p_{\rm H_2O}$ es la presión de vapor (kPa), 273,15 K (0°C) es la temperatura estándar, y 101,325 kPa es la presión estándar (kPa). El documento dedicado a la determinación del potencial bioquímico de metano por el método volumétrico proporciona información más detallada sobre este cálculo (Hafner, 2019). La presión de vapor de agua en el biogás (p_{H_2O} , kPa) se calcula con la ecuación (??) asumiendo que el biogás está saturado mediante la ecuación (??) de Alduchov and Eskridge (1996)¹.

$$p_{H_2O} = 0,61094 \cdot e^{\frac{17,625T_{hs}}{243,04+T_{hs}}} \tag{3}$$

donde T_{hs} es la temperatura en el espacio de cabeza en el momento de venteo (°C). La masa de vapor de agua en el biogás venteado (m_{H_2O}) se calcula con la ecuación (4) utilizando el peso molecular del agua $(M_{H_2O}=18.02~{\rm g/mol})$, la presión de vapor del agua en T_{hs} $(p_{H_2O},~{\rm kPa})$, la presión del biogás en la botella justo antes de ventear $(p_{hs},~{\rm kPa})$, y el volumen molar del biogás en condiciones estándar (seco, 101,325 kPa, 0°C). El volumen molar del biogás (v_b) en condiciones stardard es aproximadamente 22.300 mL/mol (Hafner et al., 2015) y la presión del biogás justo antes de ventear se estima a 150 kPa.

$$m_{H_2O} = M_{H_2O} \cdot \frac{p_{H_2O}}{p_{hs} - p_{H_2O}} \cdot \frac{1}{v_b}$$
 (4)

 $^{^{1}}$ Existen otras ecuaciones en la bibliografía, todas ellas proporcionan resultados casi idénticos.

La masa molar del biogás (M_b , g/mol) se obtiene combinando la densidad y el volumen molar del biogás como indica la ecuación (5).

$$M_b = d_b \cdot v_b \tag{5}$$

Finalmente, la fracción molar de $\mathrm{CH_4}$ metano (x_{CH_4} , adimensional) normalizado para $\mathrm{CH_4}$ y $\mathrm{CO_2}$ ($x_{CH_4} + x_{CO_2} = 1$) se calcula con la ecuación (6) mediante la diferencia normalizada entra la masa molar del $\mathrm{CO_2}$ ($M_{CO_2} = 16,042$ g/mol) y el biogás. El peso molar del $\mathrm{CH_4}$ es 44,01 g/mol.

$$x_{CH_4} = \frac{M_{CO_2} - M_b}{M_{CO_2} - M_{CH_4}} \tag{6}$$

La ecuación 6 calcula el contenido de $\mathrm{CH_4}$ en el biogás, el cual se puede usar para determinar el potencial de metanización con el método gravimétrico o volumétrico (Hafner et al., 2015). La ecuación 6 asume que el biogás solo contiene $\mathrm{CH_4}$ y $\mathrm{CO_2}$. El gas utilizado para lavar el espacio de cabeza de las botellas al inicio del ensayo puede afectar los resultados, pero los cálculos se pueden corregir para evitar esta fuente de error (Hafner et al., 2019). Finalmente recordar que la aplicación online gratuita OBA https://biotransformers.shinyapps.io/oba1/ realiza estos cálculos de forma automática.

3 Ejemplo de cálculos

En el siguiente ejemplo la producción de ${\rm CH_4}$ se calcula de una botella de un ensayo de biometanización. Para todo el ensayo, el volumen de biogás producido en condiciones estándar es 779,2 mL, mientras que la pérdida de masa total es 1,070 g.

Para determinar la densidad del biogás (d_b) utilizamos la ecuación 1, donde se utiliza la presión de vapor calculada con la ecuación (??). La temperature del espacio de cabeza (T_{hs}) se estimó en 30°C.

$$p_{H_2O} = 0,61094 \cdot e^{\frac{17.625 \cdot 30^{\circ}C}{243,04+30^{\circ}C}} = 4,237~kPa$$

A continuación usando la ecuación 4, se calcula la cantidad de vapor de agua en el biogás (m_{H_2O}) .

$$m_{H_2O} = 18.016\,\mathrm{g/mol} \cdot \frac{4.237\,\mathrm{kPa}}{150\,\mathrm{kPa} - 4.237\,\mathrm{kPa}} \cdot \frac{1\,\mathrm{mol}}{22.300\,\mathrm{mL}} = 2.348 \times 10^{-5}\,\mathrm{mg/mL}$$

Con m_{H_2O} , el volumen de biogás producido (V_{std}) y la pérdida de masa de la botella $(\Delta m_b, g)$ se calcula la densidad del biogás con la ecuación 1.

$$d_b = \frac{1,070 \ g}{779,2 \ mL} - 2,348 \cdot 10^{-5} \frac{g}{mL} = 1,35 \cdot 10^{-3} \frac{g}{mL}$$

La masa molar del biogás $(M_b, [g/mol])$ se calcula con la ecuación eq. 5 la cual combina la densidad y volumen molar del biogás.

$$M_b = 1,35 \cdot 10^{-3} \frac{g}{mL} \cdot 22.300 \ \frac{mL}{mol} = 30.11 \ \frac{g}{mol}$$

La fracción molar de CH_4 (x_{CH_4} , adimensional) se calcula teniendo en cuenta el peso molecular del CH_4 y el CO_2 mediante la ecuación 6.

$$x_{CH_4} = \frac{44,01 \frac{g}{mol} - 30,11 \frac{g}{mol}}{44,01 \frac{g}{mol} - 16,042 \frac{g}{mol}} = 0,497$$

References

- [1] Hafner, S.D., 2019, Calculation of methane production from volumetric measurements, part of the BMP-methods repository, https://github.com/sashahafner/BMP-methods
- [2] Alduchov, O.A., Eskridge, R.E., 1996, Improved Magnus form approximation of saturation vapor pressure., Journal of Applied Meteorology 35: 601-609
- [3] Hafner, S.D., Rennuit, C., Triolo, J.M., Richards, B.K., 2015, Validation of a simple gravimetric method for measuring biogas production in laboratory experiments., Biomass and Bioenergy 83: 297-301