

Modelado matemático multiespecie y simulación dinámica de una celda de electrólisis microbiana para la producción de biohidrógeno

Multi-species mathematical modeling and dynamic simulation of a microbial electrolysis cell for biohydrogen production

PhD. Juan Carlos Quintero Díaz✉¹, PhD. Diego Fernando Mendoza Muñoz✉¹

¹  Universidad de Antioquia, Departamento de Ingeniería Química, Medellín, Antioquia, Colombia.

Correspondencia: carlos.quintero@udea.edu.co

Recibido: 27 marzo 2026. Revisado: 12 mayo 2026. Aceptado: 12 junio 2026. Publicado: 02 julio 2026.

Cómo citar: J. C. Quintero Díaz and D. F. Mendoza Muñoz, "Modelado matemático multiespecie y simulación dinámica de una celda de electrólisis microbiana para la producción de biohidrógeno", *Revista Colombiana de Tecnologías de Avanzada (RCTA)*, vol. 2, no. 48, pp. 19–29, jul. 2026, doi: [10.24054/rcta.v2i48.4391](https://doi.org/10.24054/rcta.v2i48.4391)

Esta obra está bajo una licencia internacional
[Creative Commons Atribución-NoComercial 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).



Resumen: Se desarrolló un modelo matemático multipoblacional para analizar la producción de hidrógeno en Celdas de Electrólisis Microbiana (CEM) en operación continua. El modelo, implementado en Python, integra la dinámica de bacterias fermentativas, metanogénicas y electrogénicas con los fenómenos electroquímicos de la celda, y permitió evaluar el efecto del voltaje aplicado y la concentración de sustrato sobre el desempeño del sistema. Los resultados del modelo muestran que las bacterias electrogénicas forman una biopelícula madura que reduce la resistencia interna de la celda, alcanzando flujos de hidrógeno de 400 mL/d a 1,0 V y una eficiencia coulombica del 60%. Los hallazgos derivados del modelo constituyen una contribución relevante para la optimización y el escalamiento industrial de esta tecnología.

Palabras clave: hidrógeno, celdas de electrólisis microbianas, metano, eficiencia Coulombica, modelado matemático.

Abstract: A multi-population mathematical model was developed to analyze hydrogen production in Microbial Electrolysis Cells (MECs) under continuous operation. The model, implemented in Python, integrates the dynamics of fermentative, methanogenic, and exoelectrogenic bacteria with the electrochemical phenomena of the cell, and enabled assessment of the effects of applied voltage and substrate concentration on system performance. The results from the model show that exoelectrogenic bacteria form a mature biofilm that reduces the internal resistance of the cell, achieving hydrogen flow rates of 400 mL/d at 1.0 V and a Coulombic efficiency of 60%. The findings derived from the model represent a relevant contribution toward the optimization and industrial scale-up of this technology.

Keywords: hydrogen, microbial electrolysis cells, methane, Coulombic efficiency, mathematical modelling.

1. INTRODUCCIÓN

El uso intensivo de combustibles fósiles representa la causa principal del deterioro ambiental, generando diversos problemas en la salud humana y efectos sobre los ecosistemas [1], [2]. Actualmente, la matriz energética global continúa dependiendo en más de un 80% de fuentes no renovables como el petróleo, el carbón y el gas natural [3]. En este escenario, el hidrógeno (H_2) surge como un vector energético estratégico, proyectándose que para el año 2050 podría suministrar el 10% de la energía consumida globalmente [4]. No obstante, el desafío actual reside en su método de obtención: el 96% de la producción mundial de hidrógeno proviene de procesos termoquímicos que utilizan combustibles fósiles, como el reformado de metano [5]. Como una alternativa innovadora surge la tecnología de las Celdas de Electrólisis Microbiana (CEM o MEC, por sus siglas en inglés). Estas celdas permiten producir hidrógeno con un consumo energético significativamente menor que la electrólisis convencional [6].

El principio operativo de una Celda de Electrólisis Microbiana (CEM) se fundamenta en la actividad metabólica de bacterias electrogénicas. Estos microorganismos oxidan la materia orgánica y transfieren los electrones resultantes hacia el ánodo de un circuito electroquímico. Posteriormente, mediante la aplicación de un voltaje externo (típicamente entre 0.3 y 1.0 V), los electrones migran hacia el cátodo, donde los protones (H^+) presentes en el medio se reducen para producir hidrógeno gaseoso (H_2) [7], [8].

La viabilidad de las celdas MEC se potencia al utilizar aguas residuales de diversos orígenes —urbanas, agrícolas, lácteas e industriales— como sustratos de bajo costo para la generación de hidrógeno. Se ha determinado que el agua residual contiene entre 3 y 10 veces la energía necesaria para su propio tratamiento, la cual se encuentra almacenada principalmente como materia orgánica (aprox. 1.79 kWh/m^3), nutrientes y energía térmica [9], [10], [11].

En una CEM, los valores de producción de hidrógeno reportados oscilan entre $0.01\text{-}3.9 \text{ m}^3 H_2/\text{m}^3 \text{ d}$, empleando acetato y con un voltaje aplicado de 1,0 V [12], [13]. A pesar de su potencial, el empleo de aguas residuales en una CEM requiere del análisis de las variables que afectan su eficiencia y escalado [14].

En este contexto, el modelado matemático se presenta como una herramienta para la comprensión de la relación dinámica entre la biodegradación de la materia orgánica, el crecimiento de las poblaciones microbianas y los fenómenos electroquímicos ocurridos en una CEM. La descripción matemática de estos procesos es esencial para el diseño, la optimización y el escalado industrial de la tecnología [15], [16].

Los modelos de CEM que han sido propuestos se basan en los principios electroquímicos y biológicos, que previamente han sido aplicados a las celdas de combustibles microbianas. Históricamente, la mayoría de los esfuerzos se han dedicado a la modelación de celdas de combustible microbianas [17], [18], [19], pero también se han desarrollado modelos para celdas de electrólisis microbiana [16], celdas de electrosíntesis microbiana [20] y celdas de desalinización [21].

Estos modelos se basan en ecuaciones diferenciales ordinarias de balance de especies, con cinéticas tipo Monod y el empleo de ley de Faraday y la ecuación de Nernst como modelos electroquímicos. Los modelos han evolucionado para incluir análisis no solo la dinámica temporal, 0D, sino análisis en 1D, 2D y 3D que emplean ecuaciones diferenciales parciales para estudiar la distribución espacial de sustratos y biomasa [22], [23]. Además, se ha modelado la operación de estas celdas bioelectroquímicas en operación por lotes, por lote alimentado y continuo [16], [24], [25]. Se han modelado también celdas de una cámara sin el uso de membrana [19], [26] y de dos cámaras [27], [28].

También se han incorporado a los modelos, la presencia de cultivos puros simulando el comportamiento de cepas como *Shewanella* o *G. sulfurreducens* [18], [22], [27] o modelos con sistemas multiespecie simulando la presencia de consorcios bacterianos como en el caso de lodos anaerobios [16], [23] y también se han incluido estrategias de transferencia de electrones que incluyen mecanismos de transferencia directa [22], así como empleando mediadores intracelulares [16] o extracelulares [18]. El modelo de Pinto et al. [16] fue el primer modelo dinámico multi poblacional capaz de simular la producción de hidrógeno (H_2) a partir de materia orgánica compleja en una MEC de una cámara operada en forma continua. El modelo utiliza ecuaciones diferenciales ordinarias para describir el crecimiento y la actividad metabólica de cuatro poblaciones microbianas interactuando en forma de biopelícula alrededor de los electrodos. La Tabla 1 resume los factores más importantes que se

han considerado en el modelado de las celdas microbianas.

La naturaleza altamente no lineal derivada de la complejidad de las dinámicas observadas en las celdas bioelectroquímicas, representa un desafío para la identificación paramétrica y el control del sistema. En respuesta a estas limitaciones, enfoques híbridos que integran modelos mecanísticos con técnicas de aprendizaje automático —como redes neuronales recurrentes— han emergido como alternativas para mejorar la precisión predictiva y el control en tiempo real [29], [30], [31], aunque su naturaleza de "caja negra" limita la interpretabilidad física. En consecuencia, el desarrollo de modelos más refinados que integren la descripción de la biopelícula, el comportamiento dinámico de la masa y la carga, y la eficiencia del reactor, continúa siendo una necesidad prioritaria para avanzar hacia el escalado y la optimización racional de las celdas electrolíticas microbianas.

Tabla 1: Factores considerados en los modelos matemáticos de celdas de electrólisis microbianas

Criterio	Opciones			Este trabajo
Dimensión	0D	1D / 2D / 3D		0D
Cámaras	Ánodo	Cátodo	Ánodo/Cátodo	Ánodo/Cátodo
EET	Directo	Mediador endógeno	Mediador exógeno	Mediador endógeno
Cultivo	Puro	Dos especies	Consorcio	Consorcio
Operación	Lote	Lote alimentado	Continuo	Continuo

En este trabajo se plantea un modelo matemático que integre los tres fenómenos descritos previamente para una CEM de doble cámara en operación continua, con el objetivo de identificar su comportamiento dinámico y evaluar el efecto de variables como el voltaje aplicado y la alimentación de materia orgánica sobre la producción de hidrógeno y la eficiencia Coulómbica del sistema.

2. METODOLOGÍA

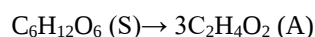
2.1. Descripción de la MEC

El modelo planteado en este trabajo, es una adaptación del modelo de Pinto et al. [16], con el objetivo de describir una CEM de doble cámara (Figura 1), en donde, a diferencia del modelo de Pinto et al., el cátodo no contiene una biopelícula microbiana y por tanto no hay consumo de H_2 ni formación de CH_4 . Adicionalmente, se considera que la biomasa floculenta se encuentra en suspensión y como biofilm en el ánodo, de tal manera que la fracción de la biomasa que sale por el efluente está representada por el parámetro α (ecuaciones 3 a 5). A la cámara anódica ingresa agua

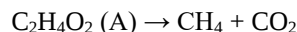
residual conteniendo materia orgánica representada por glucosa (S) y acetato (A) y sale como efluente con una reducción significativa de materia orgánica.

El lodo anaeróbico se encuentra adherido al electrodo formando una biopelícula o está en suspensión en el medio y está conformado por tres tipos de especies bacterianas, fermentativas (x_f), metanogénicas (x_m) y electrogénicas (x_e) en ese orden de mayor a menor proporción en la biomasa del lodo. Estas especies llevan a cabo las siguientes reacciones de conversión:

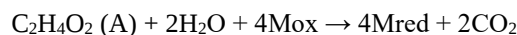
Conversión de glucosa en acetato por bacterias fermentativas (x_f):



Consumo de acetato por bacterias metanogénicas (x_m):



Consumo de acetato por bacterias electrogénicas (x_e):



En esta última reacción, se considera que las bacterias electrogénicas producen de manera endógena un mediador redox (M) que facilita la transferencia de electrones del interior de la célula al ánodo [32], [33], [34].

Los electrones entregados por las bacterias electrogénicas al ánodo son impulsados por una fuente externa de energía hacia el cátodo mientras que a través de una membrana semipermeable que separa las dos cámaras, fluyen también hacia el cátodo, los protones liberados durante la oxidación de la materia orgánica. La reacción de formación de hidrógeno en el cátodo es la siguiente:

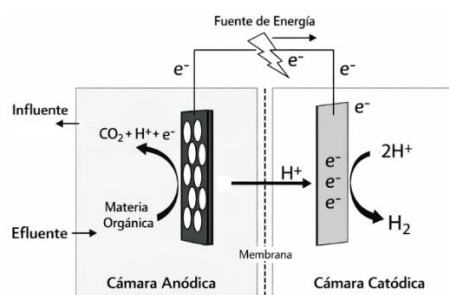
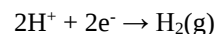


Fig. 1. Esquema de una MEC de doble cámara para la producción de hidrógeno.

El potencial termodinámico teórico de una MEC (E_{CEF}) para la producción de hidrógeno a pH de 7.0 es de -0.14 V, por lo que la reacción no es espontánea y se requiere de la aplicación de un potencial externo mayor a 0.14 V para que la producción de hidrógeno se lleve a cabo; sin embargo, los sobrepotenciales de la celda obligan a la aplicación de un voltaje superior entre 0.2 y 1.0 V [6].

2.2. Desarrollo del modelo

Los balances de materia para una MEC en flujo continuo (Figura 1), se describe en las ecuaciones 1-7. Para el balance de células se considera que éstas no salen del reactor debido a que o están adheridas al electrodo o a su sedimentación en el medio.

Balance de sustrato (S)

$$\frac{dS}{dt} = -q_f x_f + D(S_0 - S) \quad \text{Ec. 1}$$

Balance de acetato (A):

$$\frac{dA}{dt} = -q_e x_e - q_m x_m + Y_{COD} q_f x_f + D(A_0 - A) \quad \text{Ec. 2}$$

Balance de bacterias fermentativas (x_f)

$$\frac{dx_f}{dt} = \mu_f x_f - K_{df} x_f - \alpha x_f \quad \text{Ec. 3}$$

Balance de bacterias metanogénicas acetoclastas (x_m)

$$\frac{dx_m}{dt} = \mu_m x_m - K_{dm} x_m - \alpha x_m \quad \text{Ec. 4}$$

Balance de bacterias electrogénicas (x_e)

$$\frac{dx_e}{dt} = \mu_e x_e - K_{de} x_e - \alpha x_e \quad \text{Ec. 5}$$

Balance del mediador redox endógeno (M)

$$M_{Total} = M_{red} + M_{ox} \quad \text{Ec. 6}$$

$$\frac{dM_{ox}}{dt} = -Y_M q_e + \frac{\gamma}{V x_e} \frac{I_{MEC}}{nF} \quad \text{Ec. 7}$$

Las cinéticas de crecimiento (μ_i) y de consumo de sustrato (q_i) basadas en el modelo de Monod corresponden a las ecuaciones 8-13.

$$\mu_f = \mu_{máx,f} \frac{S}{K_{s,f} + S} \quad \text{Ec. 8}$$

$$\mu_e = \mu_{máx,e} \frac{A}{K_{A,e} + A} \quad \text{Ec. 9}$$

$$\mu_m = \mu_{máx,m} \frac{A}{K_{A,m} + A} \quad \text{Ec. 10}$$

$$q_f = q_{máx,f} \frac{S}{K_{s,f} + S} \quad \text{Ec. 11}$$

$$q_e = q_{máx,e} \frac{A}{K_{A,e} + A} \quad \text{Ec. 12}$$

El balance electroquímico de la celda se describe en las ecuaciones 14 a 19, donde el voltaje aplicado E_{app} debe ser suficiente para cubrir el potencial termodinámico E_{CEF} . El sobrepotencial óhmico (η_{ohm}) basado en la ley de Ohm, representa la energía que se pierde en forma de calor debido a la dificultad de los iones para moverse a través del líquido (electrolito) y la membrana, y de los electrones a través de los cables y electrodos. El sobrepotencial anódico (η_a) basado en la ecuación de Nernst aplicado al mediador biológico representa la pérdida de potencial que ocurre por la limitación en la velocidad de reducción del mediador, mientras que el sobrepotencial catódico (η_c) es una forma de la ecuación de Butler-Volmer que representa la energía necesaria para mantener la reacción química en la superficie del cátodo. R_{int} se representa por un modelo empírico propuesto por Marcus y colaboradores en 2007 [35], que propone que la resistencia interna se reduce a medida que se incrementa la biomasa de bacterias electrogénicas en el ánodo.

$$-E_{aplic.} = E_{CEF} - \eta_{ohm} - \eta_a - \eta_c \quad \text{Ec. 14}$$

$$\eta_{ohm} = I_{MEC} * R_{int} \quad \text{Ec. 15}$$

$$\eta_a = \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{M_{total}}{M_{red}} \right) \quad \text{Ec. 16}$$

$$\eta_c = \frac{RT}{\beta_m F} \sinh^{-1} \left(\frac{I_{MEC}}{A_c i_0} \right) \quad \text{Ec. 17}$$

$$I_{MEC} = \frac{E_{CEF} + E_{app} - \eta_a - \eta_c}{R_{int}} \quad \text{Ec. 18}$$

$$R_{int} = R_{min} + (R_{max} - R_{min}) e^{-K_R x_e} \quad \text{Ec. 19}$$

La velocidad de producción de metano (Q_{CH_4}) en la cámara anódica y de hidrógeno (Q_{H_2}) en la cámara catódica se representan por las ecuaciones 20 y 21.

$$Q_{CH_4} = Y_{CH_4} q_m x_m V \quad \text{Ec. 20}$$

$$Q_{H_2} = Y_{H_2} \left(\frac{I_{MEC} RT}{nF P} \right) \quad \text{Ec. 21}$$

Los parámetros cinéticos y electroquímicos se adaptaron de los valores validados por Pinto et al. [16] y se presentan en la Tabla 2.

2.3. Solución numérica del modelo

La resolución del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias se realizó mediante computación numérica en el entorno Python, empleando el algoritmo de integración de paso variable odeint de la librería SciPy. Para evaluar el impacto de los parámetros en la producción de hidrógeno, se realizó un análisis de sensibilidad local perturbando cada parámetro del modelo en 1%, manteniendo los demás constantes. Los resultados dinámicos se normalizaron y se promediaron en el tiempo mediante la métrica RMS (Root Mean Square). Finalmente, los parámetros se ordenaron en un diagrama de Pareto para identificar de forma clara las variables críticas del sistema [36], [37]. Las condiciones iniciales de las variables dinámicas empujadas fueron: $S_o = 1000$ mg/L; $A_o = 10$ mg/L; $x_{fo} = 50$ mg/L; $x_{mo} = 20$ mg/L; $x_{eo} = 5$ mg/L; $M_{ox} = 0.02$ mg/L. La solución del modelo se realizó a una tasa de dilución (D) de 0.5 1/d, con un volumen (V_{liq}) de 1 L en cada cámara de la celda. El modelo se empleó para evaluar el efecto del voltaje y la concentración de sustrato sobre la producción de H_2 , el rendimiento de H_2 en sustrato ($Y_{H_2/S}$) y la eficiencia Coulómbica (EC). Estas variables están definidas en las ecuaciones 22 y 23. Para determinar cuáles parámetros ejercen una mayor influencia sobre las variables de salida (Q_{H_2} , y EC), se realizó un análisis de sensibilidad global basado en la RMS de las sensibilidades normalizadas [36], [37].

Tabla 2: Parámetros usados en el modelo

Parámetro	Descripción	Valor
$\mu_{max,f}$ (1/d)	Tasa máxima crecimiento	0.15
$\mu_{max,e}$ (1/d)	Tasa máxima crecimiento	0.25
$\mu_{max,m}$ (1/d)	Tasa máxima crecimiento	0.1
$K_{s,f}$ (mg/L)	Constante afinidad media	100
$K_{s,e}$ (mg/L)	Constante afinidad media	20
$K_{s,m}$ (mg/L)	Constante afinidad media	80
$q_{max,f}$ (1/d)	Tasa máx. consumo sustrato	16.0
$q_{max,e}$ (1/d)	Tasa máx. consumo sustrato	14.0
$q_{max,m}$ (1/d)	Tasa máx. consumo sustrato	14.0
$K_{d,f}$ (1/d)	Tasa decaimiento	0.01
$K_{d,e}$ (1/d)	Tasa decaimiento	0.01
$K_{d,m}$ (1/d)	Tasa decaimiento	0.01
α (1/d)	Tasa lavado biomasa	0.1
Y_{COD} (mg/mg)	Rendimiento acetato/glucosa	0.75

Y_M (mg/mg)	Rendimiento mediador ox.	36.6
Y_{H_2} (-)	Eficiencia catódica	0.8
Y_{CH_4} (L/mg)	Rendimiento de metano	0.28
γ (-)	Eficiencia transferencia electrones	1.0
E_{CEF} (V)	Fuerza electromotriz	-0.3
E_{app} (V)	Voltaje aplicado a la celda	0.8
R_{min} (Ohm)	Resistencia interna mínima	20
R_{max} (Ohm)	Resistencia interna máxima	2000
K_r (L/mg)	Decaimiento resistencia biomasa	0.024
F (C/mol e)	Constante de Faraday	96485
n (mol e/mol)	Electrones transferidos	2
R (J/mol K)	Constante gas ideal	8.314
T (K)	Temperatura	303.15
P (Pa)	Presión	101325
M_{total} (M)	Conc. total mediador	0.05
V_{liq} (L)	Volumen líquido	1.0
D (1/d)	Tasa de dilución	0.5
S_o (mg/L)	Conc. sustrato influente	3000
A_o (mg/L)	Conc. acetato influente	10
β_m (-)	Transferencia carga cátodo	0.5
A_c (m ²)	Área superficial cátodo	0.22
i_o (A/m ²)	Densidad corriente intercambio	1.0

Fuente: Los valores de los parámetros fueron tomados de acuerdo con los órdenes de magnitud presentados en [16].

$$Y_{H_2/S} = \frac{Q_{H_2}}{D(S_o - S)} \quad \text{Ec. 22}$$

$$EC = \frac{I_{MEC}}{n F q_e x_e V} \quad \text{Ec. 23}$$

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las Figuras 2-5 se presenta el comportamiento dinámico de una celda de electrólisis microbiana (CEM) en donde en la cámara anódica se alimenta de manera continua agua residual con una carga orgánica representada por la glucosa y el acetato.

La dinámica de las poblaciones microbianas en la cámara anódica presenta una transición clara desde un inóculo heterogéneo hacia una comunidad especializada (Figura 2).

Al inicio de la operación, la mayor proporción de especies corresponde a las fermentativas, las cuales dominan la etapa de hidrólisis y acidogénesis, transformando el sustrato complejo (glucosa) en intermediarios metabólicos como el acetato (Figura 3). Esta jerarquía inicial, donde los fermentadores predominan sobre los metanógenos y estos a su vez sobre las electrogénicas, es característica de los lodos anaerobios convencionales utilizados como inóculo [38].

A medida que avanza el proceso, se observa un incremento sigmoidal en la biomasa de las bacterias electrogénicas (Figura 2). Este crecimiento se debe a la ventaja termodinámica que ofrece el potencial aplicado $E_{app.}$, el cual induce al ánodo a aceptar electrones. Esto permite que las bacterias electrogénicas logren una tasa de crecimiento superior a la de sus competidores en las condiciones de operación establecidas.

Por otro lado, la tasa de renovación de glucosa permite mantener una población fermentativa activa que consume la glucosa y mantiene su concentración baja transformándola en acetato. Debido al consumo de glucosa, el acetato inicialmente tiende a acumularse en el medio (Figura 3) debido al bajo consumo por parte de las metanogénicas y electrogénicas que se encuentran en una baja proporción en el medio, en estas condiciones, sin embargo, las metanogénicas consumen el acetato, generando metano en proporciones significativas (Figura 4). Sin embargo, a medida que el crecimiento de las electrogénicas aumenta, la competencia por el acetato se hace mayor conduciendo a una reducción de la producción de metano y a un incremento en la producción de hidrógeno (Figura 4) debido a la transferencia de electrones desde el ánodo.

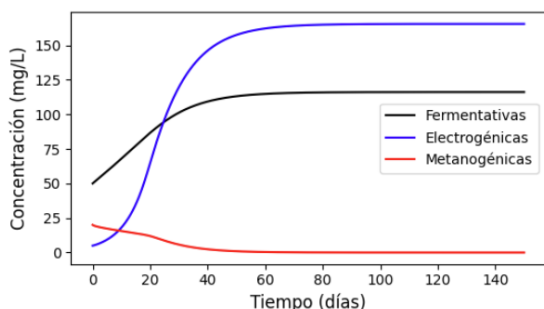


Fig. 2. Comportamiento de las especies bacterianas en la cámara anódica de una MEC

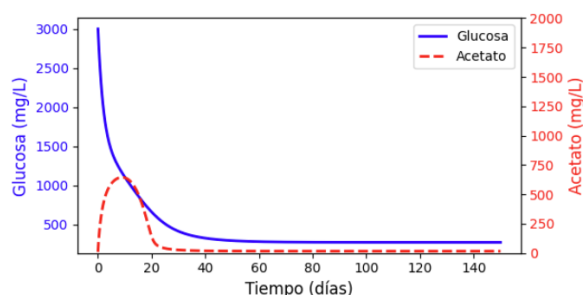


Fig. 3. Perfiles de Glucosa y Acetato en la cámara anódica de una MEC

La Figura 5 presenta el comportamiento del flujo de corriente por la CEM y la resistencia interna del sistema. A medida que la población de bacterias

electrogénicas crece y forma una biopelícula madura (alrededor del día 20 al 40), se observa una caída drástica de la resistencia, la cual se estabiliza en un valor mínimo cercano a los 100 Ω . Esta reducción de la resistencia permite el incremento en paralelo de la corriente. Este fenómeno ocurre porque la biopelícula actúa como un catalizador biológico que facilita la transferencia electrónica extracelular, reduciendo la resistencia a la transferencia de electrones al ánodo. La adaptación de lodos anaeróbicos en población electrogénica se ha reportado en diferentes trabajos [39], [40].

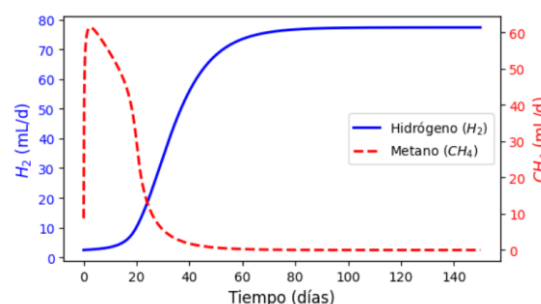


Fig. 4. Dinámica de la evolución de metano (cámara anódica) e hidrógeno (cámara catódica) en una MEC

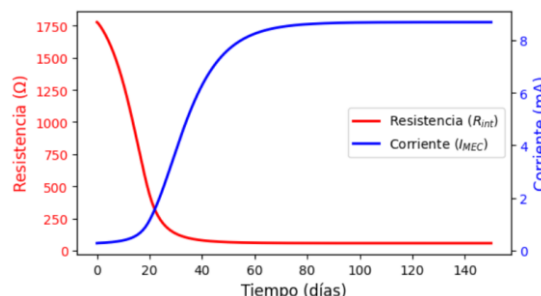


Fig. 5. Comportamiento de la resistencia interna de una MEC y producción de corriente durante la producción de hidrógeno.

La superficie de respuesta de la Figura 6, muestra una clara interdependencia entre el voltaje aplicado y la concentración de sustrato inicial sobre la producción de hidrógeno. Se observa que el voltaje es el factor más influyente, ya que al incrementarlo de 0,2 V a 1,0 V la producción de gas se eleva drásticamente hasta alcanzar valores cercanos a los 400 mL/d. Esto ocurre porque el voltaje actúa como la fuerza impulsora termodinámica necesaria para que los electrones venzan las sobretensiones del sistema y fluyan desde el ánodo hacia el cátodo. Por otro lado, el incremento del sustrato también favorece la producción de hidrógeno, pero su efecto tiende a estabilizarse conforme la concentración aumenta. Este comportamiento se debe a la cinética de saturación tipo Monod, donde las bacterias alcanzan su máxima capacidad de procesamiento metabólico y el sustrato deja de ser el factor

limitante. En la zona de bajo voltaje, la producción de H_2 permanece mínima independientemente de cuánto sustrato se añada, lo que demuestra que, sin la energía eléctrica suficiente, la biomasa no puede canalizar los electrones hacia el ánodo de manera efectiva. La máxima producción de hidrógeno se alcanza a 1,0 V y entre 6.000 y 8.000 mg/L, debido a que la saturación de sustrato y la mínima resistencia interna del sistema permiten alcanzar el máximo flujo de corriente en el sistema. La producción de hidrógeno obtenida con el modelo presenta un máximo de $0.4 \text{ m}^3/\text{m}^3.\text{d}$ encontrándose dentro del mismo orden de magnitud ($0.25\text{-}0.89 \text{ m}^3/\text{m}^3.\text{d}$) de los resultados reportados por la literatura para este tipo de celdas de doble cámara [41], [42], [43], lo que también valida la selección de los parámetros empleados.

La superficie de respuesta para la Eficiencia Coulómbica (EC) (Figura 7) revela una interacción más compleja entre el voltaje aplicado y la concentración de sustrato, diferenciándose notablemente del comportamiento de la producción de hidrógeno. Se observa que la EC alcanza su valor máximo, superior con un 60%, en una región específica de voltajes cercanos a 1,0 V, combinados con concentraciones de sustrato alrededor de 4.500 mg/L. Este comportamiento indica que, a diferencia de la producción de gas, la eficiencia de conversión requiere un equilibrio donde la carga orgánica sea lo suficientemente alta para mantener la actividad electrogénica, pero no tan excesiva como para desviar electrones hacia rutas metabólicas competidoras como acumulación de biomasa.

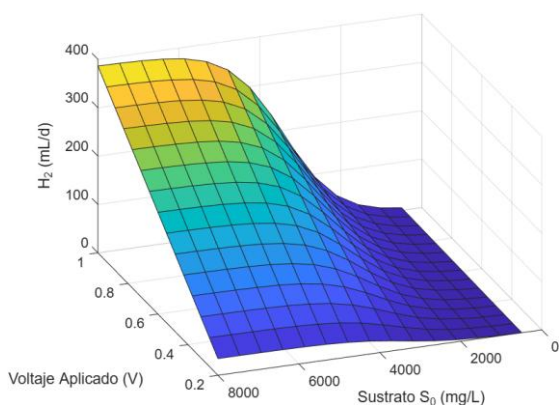


Fig. 6. Efecto del voltaje y del sustrato sobre la producción de hidrógeno en una MEC.

Se observa que tanto por debajo como por encima de una concentración de sustrato de 4.500 mg/L, la eficiencia tiende a disminuir, sugiriendo que a concentraciones muy bajas el mantenimiento celular consume proporcionalmente más energía, mientras que en concentraciones muy altas la capacidad de

transferencia electrónica del ánodo se satura. Se ha observado que voltajes altos cercanos a 1,0 V con cargas orgánicas bajas o moderadas, es una estrategia contra la actividad metanogénica favoreciendo la cinética de crecimiento de los electrogenos donde se han alcanzado eficiencias Coulómbicas entre 21% y 93% [44], [45]. Analizando el comportamiento del rendimiento de hidrógeno en sustrato ($Y_{H_2/S}$) frente a cambios en el voltaje y el sustrato, se observa una superficie de respuesta con el mismo comportamiento observado para la EC, encontrándose un máximo de 150 mL/g a las mismas condiciones óptimas, valor que se encuentra dentro de los órdenes de magnitud de los resultados reportados en otros trabajos que oscilan entre 135-340 mL/g [46], los cuales también son similares a los obtenidos por tecnologías de fermentación oscura [47].

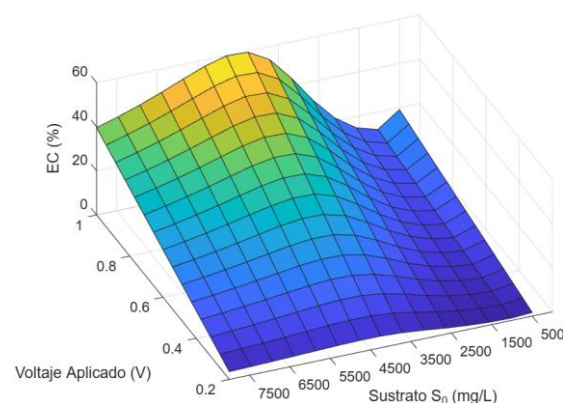


Fig. 7. Efecto del voltaje y del sustrato sobre eficiencia Coulómbica EC de una MEC.

El diagrama de Pareto de la Figura 8, señala que la tasa de crecimiento de las bacterias electrogénicas (μ_e), la concentración de sustrato inicial (S_0) y la constante de decaimiento exponencial de la resistencia interna debida a la presencia de población electrogénica (k_r) son los tres parámetros con mayor impacto en la producción de hidrógeno. La microbiología y el metabolismo de las bacterias electrogénicas rigen el comportamiento global de la celda, tal como lo demuestra la elevada sensibilidad de los parámetros μ_e (tasa de crecimiento) y q_e (tasa de consumo), los cuales impulsan la actividad de la biopelícula en el ánodo. Por su parte, la concentración inicial de sustrato S_0 , junto con la tasa de dilución D , constituyen factores críticos adicionales que representan el flujo de electrones disponible para el sistema; una limitación en este suministro restringe directamente la cinética de producción de hidrógeno al reducir la disponibilidad de donadores de electrones.

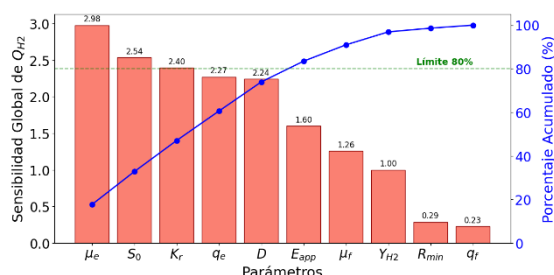


Fig. 8. Diagrama de Pareto de los parámetros del modelo con el mayor efecto sobre la producción de hidrógeno

El diagrama de Pareto del análisis de sensibilidad global para la eficiencia Coulómbica (EC) (Figura 9) revela nuevamente, que la microbiología y la bioquímica de las bacterias electrogénicas controlan el comportamiento de la celda ya que los parámetros μ_e y q_e , dictan la fracción de sustrato que se convierte realmente en corriente, mientras que el parámetro k_r es una medida de la reducción de resistencia interna para facilitar la transferencia de electrones hacia el electrodo. El voltaje aplicado E_{app} representa la energía suplementaria necesaria para superar la barrera termodinámica de la producción de hidrógeno. Este parámetro es el principal modulador de la cinética de reacción ya que un mayor voltaje acelera el metabolismo de la biopelícula electrogénica y, por ende, la intensidad de la corriente eléctrica. Con un bajo voltaje, la fuerza impulsora es débil y la resistencia interna domina; esto provoca que los electrones generados por las bacterias se desvíen hacia rutas competitivas como la metanogénesis o la síntesis de nueva biomasa, reduciendo la EC.

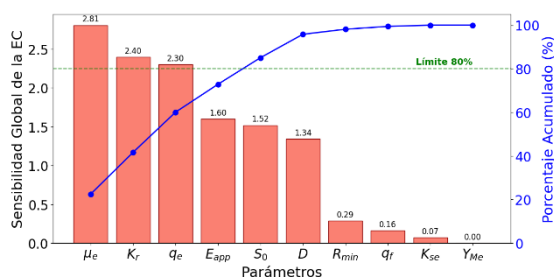


Fig. 9. Diagrama de Pareto de los parámetros del modelo con el mayor efecto sobre la producción la eficiencia Coulómbica

4. CONCLUSIONES

El modelado matemático es una herramienta imprescindible para el análisis de sistemas permitiendo predecir su comportamiento dinámico y determinar los parámetros críticos fundamentales para el diseño, la optimización y el escalado industrial de diferentes tecnologías.

Durante el análisis de la producción de hidrógeno en una CEM, se observaron como principales hallazgos la transición del inóculo hacia una biopelícula electrogénica madura rica en electrogenos que reduce drásticamente la resistencia interna facilitando la transferencia electrónica. El voltaje aplicado es uno de los factores más influyentes, logrando producciones de hasta 400 mL/d de hidrógeno a 1,0 V (de 0.4 m³/m³ d), alcanzando eficiencias Coulómbicas de hasta el 60%. Los análisis de sensibilidad mostraron que los parámetros asociados a la bioquímica de las células electrogénicas como su tasa de crecimiento y consumo de acetato, el voltaje aplicado y el suministro de sustrato, controlan el desempeño global de la celda. En consecuencia, el escalado y optimización deben priorizar la evaluación de estos parámetros para maximizar la conversión energética y la viabilidad económica del proceso.

Contribución de los autores: conceptualización: JCQD. y DFM.; metodología: JCQD; software: JCQD.; validación: JCQD; análisis formal: JCQD. y DFM.; investigación: JCQD.; metodología: JCQD; curación de datos: JCQD.; redacción—borrador original: JCQD.; redacción—revisión y edición: JCQD. y DFM.; visualización: JCQD. y DFM.; administración del proyecto: JCQD.; todos los autores han leído y aprobado la versión final del manuscrito.

Disponibilidad del código: el código en Python de la solución numérica del modelo será suministrado por los autores a los lectores interesados, previa solicitud del mismo.

REFERENCIAS

- [1] C. Carraro, S. Searle, and C. Baldino, 'Waste and residue availability for advanced biofuel production in the European Union and the United Kingdom', International Council on Clean Transportation, Working paper 2021-39, 2021.
- [2] K. Vohra, A. Vodonos, J. Schwartz, E. A. Marais, M. P. Sulprizio, and L. J. Mickley, 'Global mortality from outdoor fine particle pollution generated by fossil fuel combustion: Results from GEOS-Chem', *Environmental Research*, vol. 195, p. 110754, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.envres.2021.110754.
- [3] T. da Silva Veras, T. S. Mozer, D. da Costa Rubim Messeder dos Santos, and A. da Silva César, 'Hydrogen: Trends, production and characterization of the main process worldwide', *International Journal of*

- Hydrogen Energy*, vol. 42, no. 4, pp. 2018–2033, Jan. 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.08.219.
- [4] S. G. Nnabuife *et al.*, 'The prospects of hydrogen in achieving net zero emissions by 2050: A critical review', *Sustainable Chemistry for Climate Action*, vol. 2, p. 100024, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.scca.2023.100024.
- [5] M. T. Ahad, M. M. H. Bhuiyan, A. N. Sakib, A. B. Corral, and Z. Siddique, 'An Overview of Challenges for the Future of Hydrogen', *Materials*, vol. 16, no. 20, Oct. 2023, doi: 10.3390/ma16206680.
- [6] B. E. Logan *et al.*, 'Microbial Electrolysis Cells for High Yield Hydrogen Gas Production from Organic Matter', ACS Publications. Accessed: Oct. 27, 2022. [Online]. Available: <https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/es801553z>
- [7] H. Liu, S. Grot, and B. E. Logan, 'Electrochemically assisted microbial production of hydrogen from acetate', *Environ Sci Technol*, vol. 39, no. 11, pp. 4317–4320, Jun. 2005, doi: 10.1021/es050244p.
- [8] P. Dange *et al.*, 'Recent Developments in Microbial Electrolysis Cell-Based Biohydrogen Production Utilizing Wastewater as a Feedstock', *Sustainability*, vol. 13, no. 16, Art. no. 16, Jan. 2021, doi: 10.3390/su13168796.
- [9] Z. Dai, E. S. Heidrich, J. Dolfing, and A. P. Jarvis, 'Determination of the Relationship between the Energy Content of Municipal Wastewater and Its Chemical Oxygen Demand', *Environ. Sci. Technol. Lett.*, vol. 6, no. 7, pp. 396–400, Jul. 2019, doi: 10.1021/acs.estlett.9b00253.
- [10] E. S. Heidrich, T. P. Curtis, and J. Dolfing, 'Determination of the Internal Chemical Energy of Wastewater', *Environ. Sci. Technol.*, vol. 45, no. 2, pp. 827–832, Jan. 2011, doi: 10.1021/es103058w.
- [11] B. E. Logan and K. Rabaey, 'Conversion of wastes into bioelectricity and chemicals by using microbial electrochemical technologies', *Science*, vol. 337, no. 6095, pp. 686–690, Aug. 2012, doi: 10.1126/science.1217412.
- [12] E. Yang *et al.*, 'A review on self-sustainable microbial electrolysis cells for electro-biohydrogen production via coupling with carbon-neutral renewable energy technologies', *Bioresource Technology*, vol. 320, p. 124363, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.biortech.2020.124363.
- [13] G. Kumar *et al.*, 'Microbial electrochemical systems for sustainable biohydrogen production: Surveying the experiences from a start-up viewpoint', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 70, pp. 589–597, Apr. 2017, doi: 10.1016/j.rser.2016.11.107.
- [14] M. Muddasar *et al.*, 'Performance efficiency comparison of microbial electrolysis cells for sustainable production of biohydrogen—A comprehensive review', *International Journal of Energy Research*, vol. 46, no. 5, pp. 5625–5645, 2022, doi: 10.1002/er.7606.
- [15] S. Gadkari, S. Gu, and J. Sadhukhan, 'Towards automated design of bioelectrochemical systems: A comprehensive review of mathematical models', *Chemical Engineering Journal*, vol. 343, no. February, pp. 303–316, 2018, doi: 10.1016/j.ccej.2018.03.005.
- [16] R. P. Pinto, B. Srinivasan, A. Escapa, and B. Tartakovsky, 'Multi-Population Model of a Microbial Electrolysis Cell', *Environ. Sci. Technol.*, vol. 45, no. 11, pp. 5039–5046, Jun. 2011, doi: 10.1021/es104268g.
- [17] S. Gadkari, M. Shemfe, and J. Sadhukhan, 'Microbial fuel cells: A fast converging dynamic model for assessing system performance based on bioanode kinetics', *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 29, pp. 15377–15386, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.04.065.
- [18] X.-C. Zhang and A. Halme, 'Modelling of a microbial fuel cell process', *Biotechnol Lett*, vol. 17, no. 8, pp. 809–814, Aug. 1995, doi: 10.1007/BF00129009.
- [19] R. P. Pinto, B. Srinivasan, M.-F. Manuel, and B. Tartakovsky, 'A two-population bio-electrochemical model of a microbial fuel cell', *Bioresource Technology*, vol. 101, no. 14, pp. 5256–5265, Jul. 2010, doi: 10.1016/j.biortech.2010.01.122.
- [20] M. Kazemi, D. Biria, and H. Rismani-Yazdi, 'Modelling bio-electrosynthesis in a reverse microbial fuel cell to produce acetate from CO₂ and H₂O', *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 17, no. 19, pp. 12561–12574, 2015, doi: 10.1039/c5cp00904a.
- [21] Q. Ping, C. Zhang, X. Chen, B. Zhang, Z. Huang, and Z. He, 'Mathematical Model of Dynamic Behavior of Microbial Desalination Cells for Simultaneous Wastewater Treatment and Water Desalination', *Environ.*

- Sci. Technol.*, vol. 48, no. 21, pp. 13010–13019, Nov. 2014, doi: 10.1021/es504089x.
- [22] S. Yao, Y.-L. He, B.-Y. Song, and X.-Y. Li, 'A two-dimensional, two-phase mass transport model for microbial fuel cells', *Electrochimica Acta*, vol. 212, pp. 201–211, Sep. 2016, doi: 10.1016/j.electacta.2016.06.167.
- [23] C. Picioreanu, M. C. M. van Loosdrecht, T. P. Curtis, and K. Scott, 'Model based evaluation of the effect of pH and electrode geometry on microbial fuel cell performance', *Bioelectrochemistry*, vol. 78, no. 1, pp. 8–24, Apr. 2010, doi: 10.1016/j.bioelechem.2009.04.009.
- [24] Y. Azwar, A. K. Abdul-Wahab, and M. A. Hussain, 'Optimal Production of Biohydrogen Gas via Microbial Electrolysis Cells (MEC) in a Controlled Batch Reactor System',
- [25] A. M. Yahya, M. A. Hussain, and A. K. Abdul Wahab, 'Modeling, optimization, and control of microbial electrolysis cells in a fed-batch reactor for production of renewable biohydrogen gas', *International Journal of Energy Research*, vol. 39, no. 4, pp. 557–572, 2015, doi: 10.1002/er.3273.
- [26] B. Sirinutsomboon, 'Modeling of a membraneless single-chamber microbial fuel cell with molasses as an energy source', *Int. J. Energy Environ. Eng.*, vol. 5, no. 2–3, pp. 1–9, 2014, doi: 10.1007/s40095-014-0093-5.
- [27] Y. Zeng, Y. F. Choo, B.-H. Kim, and P. Wu, 'Modelling and simulation of two-chamber microbial fuel cell', *Journal of Power Sources*, vol. 195, no. 1, pp. 79–89, Jan. 2010, doi: 10.1016/j.jpowsour.2009.06.101.
- [28] V. B. Oliveira, M. Simões, L. F. Melo, and A. M. F. R. Pinto, 'A 1D mathematical model for a microbial fuel cell', *Energy*, vol. 61, pp. 463–471, Nov. 2013, doi: 10.1016/j.energy.2013.08.055.
- [29] M. N. Ikhmal Salehmin *et al.*, 'Modeling biohydrogen production from microbial electrolysis cells in the machine learning era: a review', *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, vol. 85, p. 104819, Jan. 2026, doi: 10.1016/j.seta.2026.104819.
- [30] M. A. Mohd Asrul, M. F. Atan, H. Abdul Halim Yun, and J. C. H. Lai, 'Mathematical model of biohydrogen production in microbial electrolysis cell: A review', *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 75, pp. 37174–37191, Oct. 2021, doi: 10.1016/j.ijhydene.2021.09.021.
- [31] A. Garg, V. Vijayaraghavan, S. S. Mahapatra, K. Tai, and C. H. Wong, 'Performance evaluation of microbial fuel cell by artificial intelligence methods', *Expert Systems with Applications*, vol. 41, no. 4, Part 1, pp. 1389–1399, Mar. 2014, doi: 10.1016/j.eswa.2013.08.038.
- [32] E. M. Conners, K. Rengasamy, and A. Bose, 'Electroactive biofilms: how microbial electron transfer enables bioelectrochemical applications', *J. Ind. Microbiol. Biotechnol.*, vol. 49, no. 4, p. kuac012, Jul. 2022, doi: 10.1093/jimb/kuac012.
- [33] C. Montoya-Vallejo, J. O. Gil Posada, and J. C. Quintero-Díaz, 'Enhancement of Electricity Production in Microbial Fuel Cells Using a Biosurfactant-Producing Co-Culture', *Molecules*, vol. 28, no. 23, Art. no. 23, Jan. 2023, doi: 10.3390/molecules28237833.
- [34] E. Marsili, D. B. Baron, I. D. Shikhare, D. Coursole, J. A. Gralnick, and D. R. Bond, 'Shewanella secretes flavins that mediate extracellular electron transfer', *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 105, no. 10, pp. 3968–3973, Mar. 2008, doi: 10.1073/pnas.0710525105.
- [35] A. Kato Marcus, C. I. Torres, and B. E. Rittmann, 'Conduction-based modeling of the biofilm anode of a microbial fuel cell', *Biotechnology and Bioengineering*, vol. 98, no. 6, pp. 1171–1182, 2007, doi: 10.1002/bit.21533.
- [36] A. Saltelli, M. Ratto, S. Tarantola, and F. Campolongo, 'Sensitivity Analysis for Chemical Models', *Chem. Rev.*, vol. 105, no. 7, pp. 2811–2828, Jul. 2005, doi: 10.1021/cr040659d.
- [37] A. Varma, M. Morbidelli, and H. Wu, *Parametric sensitivity in chemical systems*, vol. 1. Cambridge University Press Cambridge, 1999. Accessed: Mar. 22, 2026. [Online]. Available: <https://www.academia.edu/download/118001995/248350749.pdf>
- [38] W. Cai *et al.*, 'Biocathodic Methanogenic Community in an Integrated Anaerobic Digestion and Microbial Electrolysis System for Enhancement of Methane Production from Waste Sludge', *ACS Sustainable Chem. Eng.*, vol. 4, no. 9, pp. 4913–4921, Sep. 2016, doi: 10.1021/acssuschemeng.6b01221.
- [39] J. C. Quintero-Díaz and J. O. Gil-Posada, 'Batch and semi-continuous treatment of cassava wastewater using microbial fuel cells and metataxonomic analysis', *Bioprocess*

- Biosyst Eng*, vol. 47, no. 7, pp. 1057–1070, Jul. 2024, doi: 10.1007/s00449-024-03025-0.
- [40] S. J. Satinover, M. Rodriguez, M. F. Campa, T. C. Hazen, and A. P. Borole, ‘Performance and community structure dynamics of microbial electrolysis cells operated on multiple complex feedstocks’, *Biotechnol Biofuels*, vol. 13, no. 1, p. 169, Oct. 2020, doi: 10.1186/s13068-020-01803-y.
- [41] P. Batlle-Vilanova *et al.*, ‘Assessment of biotic and abiotic graphite cathodes for hydrogen production in microbial electrolysis cells’, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 3, pp. 1297–1305, Jan. 2014, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.11.017.
- [42] L. Lu, D. Xing, N. Ren, and B. E. Logan, ‘Syntrophic interactions drive the hydrogen production from glucose at low temperature in microbial electrolysis cells’, *Bioresource Technology*, vol. 124, pp. 68–76, Nov. 2012, doi: 10.1016/j.biortech.2012.08.040.
- [43] L. Cristiani *et al.*, ‘Enhancing energy efficiency and H₂ production in lab-scale dual chamber microbial electrolysis cells: A focus on catholyte composition and voltage losses’, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 12, no. 1, p. 111782, Feb. 2024, doi: 10.1016/j.jece.2023.111782.
- [44] T. H. J. A. Sleutels, S. D. Molenaar, A. T. Heijne, and C. J. N. Buisman, ‘Low Substrate Loading Limits Methanogenesis and Leads to High Coulombic Efficiency in Bioelectrochemical Systems’, *Microorganisms*, vol. 4, no. 1, Jan. 2016, doi: 10.3390/microorganisms4010007.
- [45] I. Ivanov, L. Ren, M. Siegert, and B. E. Logan, ‘A quantitative method to evaluate microbial electrolysis cell effectiveness for energy recovery and wastewater treatment’, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 30, pp. 13135–13142, Oct. 2013, doi: 10.1016/j.ijhydene.2013.07.123.
- [46] L. Zhang, Y. Bai, J. Sang, J. Dong, X. Wu, and Q. Ban, ‘Enhanced Biohydrogen Production through Dark Fermentation by Humic Acid: Insights into Microbial Composition and Functional Genes’, *J Microbiol Biotechnol*, vol. 35, p. e2412071, Jun. 2025, doi: 10.4014/jmb.2412.12071.
- [47] R. Abdallah *et al.*, ‘Dark fermentative hydrogen production by anaerobic sludge growing on glucose and ammonium resulting from nitrate electroreduction’, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 12, pp. 5445–5455, Apr. 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.02.030.