



**Casa abierta al tiempo**

**UNIVERSIDAD AUTONOMA  
METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA**

División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
Departamento de Ingeniería de Proceso e Hidráulica

***“MODELO DINÁMICO DE UN  
REACTOR BIOLÓGICO DE TRES FASES”***

Tesis que presenta :

**I.Q. Ignacio Fitta Gutiérrez**

para obtener el grado de Maestro en Ingeniería Química

Asesores de Tesis :

Dr. Felipe López Isunza

Dr. Rafael Alfredo Chávez Rivera

Julio de 1996

---

*“MODELO DINÁMICO DE UN  
REACTOR BIOLÓGICO  
DE TRES FASES”*

Tesis que presenta :

I.Q. Ignacio Fitta Gutiérrez

para obtener el grado de Maestro en Ingeniería Química

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

Julio de 1996

---

## AGRADECIMIENTOS

*“Este trabajo esta dedicado a todas aquellas personas que con su apoyo, comprensión y amistad hicieron posible alcanzar un escalón más en una lucha de superación personal.”*

Quiero agradecer especialmente a mis padres ya que sin su apoyo y motivación este trabajo no hubiera sido posible. A Oscar I. porque me dio el impulso para comenzar mis estudios de Maestría.

Quiero agradecer también, al Dr. Felipe López Isunza por la invitación para realizar este trabajo; por su consejos y comentarios los cuales enriquecieron e hicieron que este escrito fuera mas legible. Al Dr. Rafael Chávez Rivera por sus valiosos comentarios referentes a la parte biológica.

Un agradecimiento extenso al jurado compuesto por el Dr. Gerardo Saucedo Castañeda y el Dr. Eduardo Gutiérrez López, quienes además de revisar este trabajo lo enriquecieron con sus comentarios.

A mis amigos : Alma, Elizabeth, Rafael, Paty, Ángel y Alejandro por su amistad y cooperación.

Quiero Agradecer también el apoyo, la amistad y la comprensión de la Lic. Gabriela Regalado Baeza, la Lic. María Elena Regalado Baeza y F. Rocío Escobar Santamaria

Finalmente agradecer al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico brindado durante el tiempo en que se desarrollo este trabajo.

---

*El conocimiento es el uno por  
ciento de inspiración y el noventa  
y nueve por ciento de transpiración.*

---

## RESUMEN

En este trabajo se desarrolla un modelo matemático para describir el comportamiento hidrodinámico de un reactor biológico de aire ascendente usado en la eliminación de compuestos orgánicos en aguas de desecho industrial. El modelo propuesto involucra a tres especies que son: oxígeno, sustrato y microorganismos. Las ecuaciones de conservación de las tres especies se plantean para tres fases: gaseosa, líquida y sólida (biopelícula). El modelo que resulta de los balances de las especies permite hacer un estudio del efecto que tiene la transferencia de oxígeno en la fase gas y líquida.

El modelo matemático describe a la fase gas con un régimen de flujo de tipo pistón, es decir, que existen gradientes en la concentración de oxígeno en dirección axial. La fase líquida considera homogeneidad en cualquier punto del reactor biológico, es decir, se considera el comportamiento de un reactor continuo perfectamente mezclado. La fase sólida que involucra a la biopelícula se considera como un catalizador externamente depositado, no existe difusión dentro del espesor biológicamente activo.

El modelo matemático que resulta de los balances de materia de las especies involucradas consiste un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de tipo hiperbólico. Este sistema de ecuaciones se encuentra acoplado mediante los términos de transferencia de masa interfacial en las tres fases. Para resolver las ecuaciones se utilizaron tres técnicas numéricas: método de las características, colocación ortogonal utilizando 6 y 12 puntos interiores y uno de los métodos implícitos de Runge-Kutta de cuarto orden.

El estudio en la hidrodinámica que se realizó determina que no existen efectos en el crecimiento celular y en la eliminación de sustrato cuando se aumenta la velocidad del gas a la entrada del reactor.

En este trabajo se hace también, un análisis del comportamiento dinámico del reactor biológico; esto se realiza introduciendo perturbaciones o cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada y cambios en el tiempo de residencia al sistema en forma de escalones. Se hace también, una comparación del aumento en la concentración de biomasa cuando se utilizan diferentes

---

términos de inhibición y limitación de oxígeno, sustrato y biomasa en la ecuación que representa la cinética de crecimiento.

El análisis de los resultados obtenidos sugieren básicamente lo siguiente:

- La resistencia que domina el proceso es la transferencia de masa interfacial gas-líquido.
- La transferencia de oxígeno juega un papel importante en el proceso ya que la cantidad presente de esta especie limita el crecimiento microbiano y con esto la eficiencia del proceso.
- El sistema es dinámicamente estable, ya que variaciones en las condiciones de operación fueron amortiguadas satisfactoriamente por el biorreactor.
- Los resultados numéricos obtenidos a partir de las simulaciones representan cualitativamente los resultados experimentales obtenidos por Chávez-Rivera (1994).
- La hidrodinámica del sistema no juega un papel importante en la eficiencia del proceso

La biopelícula presenta tres resistencias a la transferencia de masa, en la interfase líquido-biopelícula, difusión interna y biorreacción. Al considerar un catalizador externamente depositado se redujeron las tres resistencias a una sola. Un trabajo interesante consistiría en realizar un estudio de la hidrodinámica del sistema acoplado con los fenómenos de transporte tanto internos como externos en la biopelícula.

Este trabajo consiste de cinco capítulos y dos apéndices. La parte central de este trabajo esta contenida en los últimos tres capítulos. Todas las unidades empleadas son consistentes con el Sistema Internacional de Unidades (SI).

El Capítulo 1 es la introducción de este trabajo. En el se incluye una breve descripción de la importancia del agua en los seres vivos, las principales causas de su contaminación y los métodos utilizados para su tratamiento. Se hace también la descripción del problema que motiva la realización de este trabajo, así como de los objetivos que se pretenden alcanzar.

En el Capítulo 2 se establece todo el marco teórico necesario para la realización del trabajo. El capítulo comienza con una descripción de los sistemas utilizados para remover compuestos orgánicos de corrientes líquidas, la formación de películas biológicas y el metabolismo microbiano. Este capítulo finaliza con un resumen de la transferencia de masa interfacial y de las correlaciones mas utilizadas para evaluar los coeficientes de transferencia interfacial.

---

El Capitulo 3 presenta la descripción del sistema utilizado para la construcción del modelo. Posteriormente se muestran los diferentes modelos cinéticos de crecimiento, los factores que alteran el crecimiento e inhibición. El capítulo termina con el modelo que describe el sistema utilizado.

En el Capitulo 4 se presentan los resultados numéricos de la solución del modelo. Se muestran los perfiles axiales de concentración de oxígeno, sustrato y crecimiento microbiano utilizando 6 y 12 puntos interiores de colocación para tiempos de residencia de 1, 2 y 5 horas. Los resultados son discutidos realizando comparaciones en cuanto al número de puntos de colocación utilizados y tiempos de residencia empleados.

El Capitulo 5 muestra los perfiles de concentraciones de las especies como función del tiempo. Los resultados mostrados en este capítulo son una representación de la concentración a la salida del reactor. Se hace también, un análisis del comportamiento del sistema modelado cuando se aplican diferentes cambios en los parámetros de transporte y condiciones de operación. Se realiza un análisis de la respuesta dinámica del sistema cuando se implementan cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada del reactor. La finalidad es observar el comportamiento y la estabilidad dinámica del sistema. El capítulo finaliza mostrando resultados numéricos cuando se emplean diferentes términos en la cinética microbiana como, términos de inhibición y limitación de uno de los componentes.

El capítulo 6 corresponde a las conclusiones generales que se pueden obtener al hacer el análisis de los resultados de los capítulos 4 y 5. En este capítulo se adiciona un pequeño párrafo en el cual se plantea un trabajo a futuro el cual completara el estudio realizado en este trabajo.

El apéndice se presenta información mas detallada acerca de la construcción del modelo dimensional y adimensional, y las técnicas numéricas empleadas para resolver las ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas que resultan de los balances de masa.

---

# CONTENIDO

Resumen	i
Contenido	iv
Nomenclatura	vii
<b>Capítulo 1. Reactores Biológicos</b>	<b>1</b>
1.1 Introducción	1
1.1.1 Métodos de Tratamiento	1
1.1.2 Contaminación del Agua	2
1.1.3 Tratamiento de Aguas Residuales	3
1.2 Reactores Biológicos	5
1.2.1 Generalidades	5
1.2.2 El Ambiente de los Reactores Biológicos	6
1.2.3 Reactores Biológicos Aeróbios	7
1.3 Películas Biológicas	7
1.3.1 La Naturaleza de la Películas Biológicas	8
1.4 Configuraciones y Aplicaciones de Reactores Biológicos	10
1.4.1 Reactores por Lote	10
1.4.2 Reactores Continuos	10
1.5 Fenómenos de Transporte en un Reactor Biológico	12
1.5.1 Ruta Física de los Procesos de Transporte en Reactores Biológicos	12
1.5.2 Transferencia de Oxígeno y Coeficiente de Transferencia de Masa	13

---



<b>Capítulo 5. Comportamiento Operacional del Reactor Biológico</b>	<b>66</b>
5.1 Concentraciones de Sustrato Mayores en la Entrada del Reactor	67
5.2 Cambios Repentinos en la Concentración de Sustrato a la Entrada del Biorreactor	73
5.3 Efecto en el Crecimiento Celular en Función de la Hidrodinámica del Reactor	77
5.4 Efecto en el Comportamiento Utilizando Diferentes Términos en la Cinética de Crecimiento	81
<b>Capítulo 6 Conclusiones y Perspectivas</b>	<b>87</b>
6.1 Conclusiones	87
6.2 Perspectivas o Trabajos a Futuro	91
<b>Bibliografía</b>	<b>92</b>
<b>Apéndice A. Métodos Numéricos de Solución</b>	<b>96</b>
A.1 El método de las Características	96
A.2 El Método de Colocación Ortogonal	99

---

## NOMENCLATURA

- $A_1$  ( $t_{ref} K_{LS} a_{vb}$ ) No. de unidades de transferencia de masa fase gas, (adimensional)
- $A_2$  ( $t_{ref} / t_{res}$ ) razón numérica entre el tiempo de referencia y el tiempo de residencia, (adimensional)
- $A_3$  ( $A_1 (\epsilon_g / \epsilon_l)$ ) No. de unidades de transferencia de masa por la fracción de gas entre la del líquido, (adimensional)
- $A_4$  ( $t_{ref} k_{ls} a_{vls}$ ) No. de unidades de transferencia de masa en la fase líquida, (adimensional)
- $A_5$  ( $\frac{X_o \mu_{máx} t_{ref}}{Y_{X/O_2} C_{O_2o}}$ ) razón entre la cantidad de biomasa producida y la cantidad de oxígeno consumido, (adimensional)
- $A_6$  ( $A_4 (\epsilon_l / \epsilon_s)$ ) No. de unidades de transferencia de masa por la fracción de líquido entre la del sólido, (adimensional)
- $A_7$  ( $\frac{X_o \mu_{máx} t_{ref}}{Y_{X/S} C_{So}}$ ) razón entre la cantidad de biomasa producida y la cantidad de sustrato consumido, (adimensional)
- $A_8$  ( $\mu_{máx} t_{ref}$ ) razón entre el tiempo de residencia del aire entre la tasa máxima de crecimiento celular, (adimensional)
- $Co_{2g}$  concentración de oxígeno en la fase gas, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2o}$  concentración de oxígeno a la entrada del reactor, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2g\text{equ}}$  concentración de oxígeno en la fase gas en el arranque del reactor, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2l}$  concentración de oxígeno en la fase líquida, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2l\text{equ}}$  concentración de oxígeno en la fase líquida en el arranque del reactor, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2s}$  concentración de oxígeno en la fase sólida, ( $kg/m^3$ )
- $Co_{2s\text{equ}}$  concentración de oxígeno en la fase sólida en el arranque del reactor, ( $kg/m^3$ )
- $C_{S1}$  concentración de sustrato en la fase líquida, ( $kg/m^3$ )
- $C_{S1\text{equ}}$  concentración de sustrato en la fase líquida en el arranque del reactor, ( $kg/m^3$ )

$C_{SS}$	concentración de sustrato en la fase sólida, ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$C_{SS \text{ equ}}$	concentración de sustrato en la fase sólida en el arranque del reactor, ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$D_b$	diámetro promedio de burbuja, (m)
$D_C$	diametro de la columna, (m)
$D_i$	difusividad molecular de axígeno en agua, ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$g$	aceleración de la gravedad, (9.81 m/s)
$F$	flujo volumétrico de líquido, ( $\text{m}^3/\text{s}$ )
$H$	constante de la Ley de Henry, (concentración de $\text{O}_2$ en el gas/ concentración de $\text{O}_2$ en el líquido)
$k_{gl \text{ a}_{vb}}$	coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líqu, ( $\text{s}^{-1}$ )
$k_{lS \text{ a}_{v \text{ lS}}}$	coeficiente de transferencia de masa en la interfase líq-sól, ( $\text{s}^{-1}$ )
$L$	longitud del bioreactor, (m)
$M_{\text{O}_2}$	parámetro de mantenimiento de oxígeno adimensional
$M$	parámetro de mantenimiento de sustrato adimensional
$m$	velocidad específica de consumo de sustrato para mantenimiento celular, ( $\text{s}^{-1}$ )
$r$	concentración adimensional para sustrato en la fase sólida
$\mathcal{R}_{\text{O}_2}$	tasa de consumo de oxígeno, ( $\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$ )
$\mathcal{R}_X$	tasa de crecimiento de biomasa, ( $\text{kg}/\text{m}^3 \text{ s}$ )
$s$	concentración de sustrato en la fase líquida, ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$S$	concentración adimensional de sustrato para la fase líquida
$t$	tiempo, (s)
$t_{\text{ref}}$	( $L/ U_g$ ) tiempo de referencia, (s)
$t_{\text{resid}}$	( $V_T/ F$ ) tiempo de residencia, (s)
$u$	concentración adimensional para oxígeno en la fase gas
$u_g$	velocidad superficial de gas, (m/s)
$v$	concentración adimensional para oxígeno en la fase líquida
$V_T$	volumen total del bioreactor, ( $\text{m}^3$ )
$w$	concentración adimensional para oxígeno en la fase sólida
$x$	concentración de microorganismos, ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )

$x_0$	concentración inicial de microorganismos, ( $\text{kg}/\text{m}^3$ )
$X$	concentración adimensional de microorganismos
$Y_{X/O_2}$	coeficiente de rendimiento de oxígeno, ( $\text{kg} / \text{kg}$ )
$Y_{X/S}$	coeficiente de rendimiento de sustrato, ( $\text{kg} / \text{kg}$ )
$z$	coordenada axial

### Letras Griegas.

$\epsilon_g$	$(V_g / V_T)$ fracción de gas
$\epsilon_l$	$(V_l / V_T)$ fracción de líquido
$\epsilon_s$	$(V_s / V_T)$ fracción de sólido
$\mu_{\text{máx}}$	tasa máxima de crecimiento celular
$\nu_L$	viscosidad cinemática de la líquida, ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$\sigma$	tensión superficial, ( $\text{N}/\text{m}$ )
$\xi$	coordenada axial adimensional
$\theta$	tiempo adimensional
$\theta_t$	$(t_{\text{ref}} / t_{\text{res}})$ fracción de tiempo adimensional (adimensional)
$\theta_{\epsilon gl}$	cociente de fracciones de volumen gas-líquido
$\theta_{\epsilon ls}$	cociente de fracciones de volumen líquido-sólido

# CAPITULO 1

## REACTORES BIOLÓGICOS

### 1.1 INTRODUCCIÓN

#### 1.1.1 MÉTODOS DE TRATAMIENTO

Uno de los principales problemas que surge a partir del desarrollo industrial es la producción de desechos sólidos, líquidos y gaseosos que se suman al problema de la contaminación ambiental. En varios países han surgido leyes para tener un control del nivel de la contaminación ambiental y tratar de detener el deterioro del mundo en donde vivimos.

A raíz de lo anterior, la comunidad industrial ha buscado formas sencillas y económicas para eliminar sus desechos. Existen tres métodos de tratamiento de contaminantes:

a) tratamientos físicos tales como absorción y adsorción de contaminantes en materiales líquidos o sólidos y radiación UV. La utilización de columnas de burbujeo y adsorción en carbón activado son algunos ejemplos.

---

b) tratamientos químicos como la incineración, combustión catalítica y cloración.

c) tratamientos biológicos, biorreactores. Los métodos biológicos ofrecen considerables ventajas con respecto a los otros dos, ya que operan a temperaturas y presiones normales, los costos de inversión y de operación son típicamente menores y generalmente se tiene un porcentaje de eliminación cercana al 100 % (Ottengraf y Van den Oever, 1983). El equipo requiere poca energía, y lo más importante es que no se producen desechos secundarios. Estas ventajas hacen que los métodos de eliminación de contaminantes utilizando microorganismos sean ampliamente usados en la industria.

### 1.1.2 CONTAMINACIÓN DEL AGUA

El agua es uno de los principales materiales que dan soporte a diferentes formas de vida. La mayoría de los seres vivos se componen en más de 60 % de agua (Lehninger, 1975). Para sobrevivir y llevar a cabo cualquier actividad es necesario contar con este material. En el planeta existen 1 360 000 000 km<sup>3</sup> de agua, desafortunadamente, de esta cantidad solo el 2.7 % es agua que puede ser consumida por el hombre, el resto es agua de mar, aguas congeladas y aguas contaminadas.

El suministro de agua necesaria para la vida se da mediante un ciclo que comienza en la precipitación de agua por las nubes, la filtración de esta en la superficie terrestre seguida de la evaporación y transpiración de agua a la atmósfera. Las tasas de precipitación y evaporación ayudan a definir una base para medir la cantidad de agua útil para el consumo humano (Aarne y Weiner, 1989).

Las industrias contribuyen a la contaminación de los sistemas de aguas naturales, como lagos, ríos etc. Los sectores industriales que descargan mayor cantidad de contaminantes son principalmente dos: la industria petroquímica y la de alimentos procesados. En México existen aproximadamente 15 000 fábricas que utilizan agua para diferentes servicios, la transferencia de calor, generación de energía y la aplicación a procesos son los más importantes. Debido a la poca cantidad de agua utilizable para la actividad humana y a la reciente aparición de legislaciones, la industria se ha visto obligada a adoptar medios para el tratamiento de aguas residuales (American Society, 1982).

---

### 1.1.3 TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES

Las descargas en los sistemas de drenajes sanitarios se componen de aguas residuales de tipo doméstico, industrial y por efecto pluvial. Las descargas de desechos industriales varían con el tamaño, tipo y pre-tratamientos con que cuente la industria.

El objetivo de los tratamientos de aguas residuales es reducir las concentraciones de contaminantes específicos a niveles donde las descargas al medio ambiente no sean adversas. El tratamiento de aguas residuales consiste en reducir la concentración de compuestos que pueden causar un daño al ambiente o un peligro a la salud. La reducción de esos compuestos es solo para niveles requeridos. La producción de agua destilado o desionizada a partir de aguas residuales es técnicamente posible, pero esto no es necesario ya que puede deteriorar el ecosistema y ciclo del agua.

El tratamiento de aguas residuales comprende varias etapas individuales; la figura 1.1 muestra un esquema simplificado de una planta de tratamiento.

Las plantas de tratamiento consisten de tres a cuatro etapas dependiendo de la calidad de agua que se requiera tratar. Estas etapas son :

1. Pre-tratamiento
2. Tratamiento primario
3. Tratamiento secundario
4. Tratamiento terciario.

El pre-tratamiento consiste en remover cualquier clase de sustancia sólida que se encuentra flotando en la corriente de agua residual. Para llevar a cabo la eliminación de sólidos en suspensión se utilizan una serie de pantallas con barras de acero en forma de rejillas donde quedan atrapados los materiales que puedan dañar el equipo de tratamiento. Posteriormente, la corriente de agua residual se hace pasar por la etapa de tratamiento primario, el cual consiste en una serie de tanques sedimentadores; el objetivo de estos es la remoción de materia sólida, como lodos, que se encuentran

---

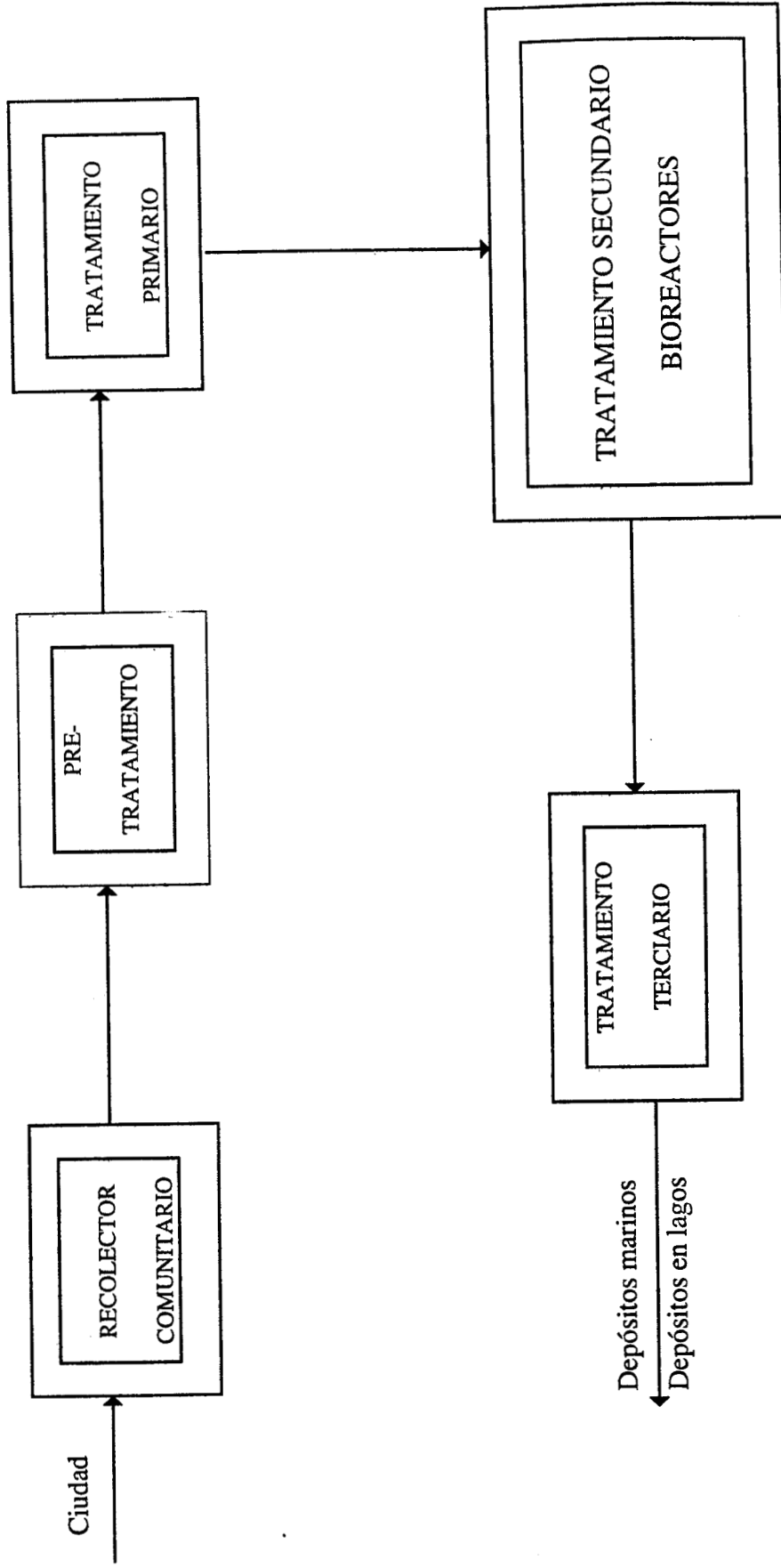


Fig. 1.1 Diagrama de Bloques. Planta de Tratamiento de Aguas Residuales



en el fondo de la corriente de agua. El líquido que sale de los tanques sedimentadores, conocidos como clarificadores, pierde la mayor parte de materia sólida orgánica.

Posteriormente, el agua residual pasa por un tratamiento secundario. En esta etapa se elimina materia orgánica e/o inorgánica disuelta en el medio por la acción microbiana. Los sistemas más utilizados son los **reactores biológicos** continuos agitados, empacados, de escurrimiento, lecho fluidizado y tanques de aeración con lodos activados.

El tratamiento terciario consiste en una serie de técnicas que permiten alcanzar una calidad de agua que depende de la utilización posterior. En esta etapa se utilizan métodos físicos y químicos para eliminar impurezas. Los equipos que se utilizan en esta etapa son adsorbedores, tanques cloración etc. (Aarne y Jeffrey, 1989)

## 1.2 REACTORES BIOLÓGICOS

### 1.2.1 GENERALIDADES.

La biotecnología es una integración de microbiología, bioquímica, biología molecular e ingeniería química con el propósito de utilizar microbios, plantas y enzimas para la síntesis de productos o el desempeño de un servicio tal como una planta de tratamiento de aguas de desecho. La parte central del proceso biotecnológico es el "Reactor Biológico o Biorreactor". Estos sistemas proveen la unión entre la materia prima y el producto final (Bothast y Sliniger, 1989). Un reactor biológico es un dispositivo donde los materiales son tratados para promover transformaciones bioquímicas por la acción de células vivas o por componentes celulares tales como enzimas. Los reactores biológicos son ampliamente usados en la industria de la fermentación, alimentos, tratamiento de aguas y biomedicina (Moo-Young y Blanch, 1987).

Considerando el papel central de los reactores biológicos y la diversidad de industrias, no es sorprendente la existencia de una gran variedad de formas y tamaños. De cualquier modo, por su forma de operación, solo hay tres tipos de reactores biológicos cuya clasificación más general es: reactores biológicos por lote, continuos y semicontinuos.

Los reactores continuos se utilizan con más frecuencia para eliminación de productos no deseados en aguas de desecho industrial. Un reactor biológico continuo puede ser considerado como

un reactor catalítico heterogéneo de dos o tres fases. La fase líquida contiene normalmente el sustrato en forma disuelta en el agua de desecho que se requiere tratar; el biocatalizador o fase sólida la componen los microorganismos, estos se pueden encontrar suspendidos en el medio líquido o inmovilizados en un soporte. La fase gas esta representada generalmente por aire, en el caso de los procesos aeróbios (Gaudy y Gaudy, 1980).

Un gran número de investigaciones han sido conducidas para desarrollar técnicas para inmovilizar enzimas y células. Los reactores biológicos continuos utilizan estos biocatalizadores para lograr una alta productividad o remoción del producto de interés. Estos sistemas pueden ser clasificados dentro de dos grupos dependiendo del medio en donde se localice el catalizador biológico: reactores de lecho fijo y de lecho móvil. Los sistemas de crecimiento suspendido o lecho móvil son generalmente dispositivos abiertos donde los microorganismos están dispersos en la fase líquida. Por su parte los sistemas soportados se componen de películas biológicas que se forman por el crecimiento espontáneo de microorganismos en la superficie de un empaque.

Los reactores biológicos pueden clasificarse también, de acuerdo al tipo de microorganismo que se utilizan como biocatalizadores y estos pueden ser: reactores aeróbios y reactores anaerobios. La diferencia entre ellos es que para los primeros se utilizan microorganismos que requieren de oxígeno para llevar a cabo su actividad metabólica.

### **1.2.2 EL AMBIENTE DE LOS REACTORES BIOLÓGICOS**

El ambiente que describe una óptima operatividad de los biorreactores puede ser considerado bajo tres tipos : ambiente biológico, ambiente químico y ambiente físico.

El ambiente biológico debe ser favorable para el proceso biológico cuando se desea que los microorganismos contribuyan al proceso desde el punto de vista de producción. Una cantidad suficiente de microorganismos y la prevención de un riesgo de contaminación son ejemplos de reglas que definen el ambiente biológico.

El ambiente químico involucra la composición química para el crecimiento microbiano. Composición y concentración de sustrato o nutrientes, composición de microorganismos libres de sustancias inhibitorias, control de pH deseado y solubilidad de O<sub>2</sub> son algunas características que rigen el ambiente químico.

---

El medio físico se refiere principalmente a la temperatura del sistema; el control de esta variable es una consideración importante en el diseño de reactores biológicos (Winkler, 1988).

### 1.2.3 REACTORES BIOLÓGICOS AERÓBIOS

Los reactores biológicos pueden operar en presencia o ausencia de oxígeno. Cuando los microorganismos requieren de oxígeno molecular para completar la transformación del sustrato y completar su metabolismo el proceso se denomina aeróbico. Si el proceso se lleva a cabo en ausencia de oxígeno, este se denomina anaeróbico. En estos últimos, la mayor parte del carbono se emplea como fuente de energía y el 2 % se asimila como material celular (Quintero, 1981).

## 1.3 PELÍCULAS BIOLÓGICAS

La inmovilización de microorganismos es el proceso por el cual se adhieren células a un material sólido que actúa como soporte en un reactor biocatalítico. Hay muchas técnicas para inmovilizar microorganismos dentro de un biorreactor. Para reactores de tratamiento de aguas, la más importante es la colonización espontánea en la superficie del soporte. Muchos microorganismos tienen la habilidad natural de colonizar superficie y, algunas veces, esta característica puede ser perjudicial; por ejemplo, puede acelerar la corrosión en sistemas de distribución de agua, incrementar la resistencia a la transferencia de calor en intercambiadores, etc. (Characklis y Wilderer, 1989).

El crecimiento de las células se ve favorecido por diversos factores físicos, químicos y biológicos teniendo como resultado una acumulación de microorganismos en la superficie de un soporte, a este acumulado se le denomina biopelícula. Una biopelícula puede ser definida como una agregación de microorganismos que semejan una capa fija en una superficie sólida y es usualmente idealizada como si estuviera compuesta de una matriz homogénea de bacterias y del polímero extracelular que enlaza a estas en la superficie (Sáez y Rittmann, 1988).

---

Las biopelículas pueden ser desarrolladas en la superficie de diferentes materiales, como piedras, piezas de plástico de alta calidad, gomas plásticas, o diferentes tipos de empaques como anillos Rasching, Lessing, Pall o empaques en forma de laminas.

### 1.3.1 LA NATURALEZA DE LAS PELÍCULAS BIOLÓGICAS.

Los procesos y factores que se observan en las biopelículas y que son determinantes para su desarrollo son:

a) Transporte de materia desde el seno del fluido hacia la superficie de la biopelícula fija en el soporte.

b) Metabolismo microbiano dentro de la película. El crecimiento microbiano y la producción de polímeros extracelulares por los microorganismos contribuyen al depósito e incremento en el espesor de la biopelícula facilitando la adherencia de sólidos inorgánicos suspendidos.

c) El esfuerzo de corte en la superficie de la película. Tales fuerzas pueden limitar el depósito y crecimiento global de la biopelícula.

d) Propiedades físicas de la superficie del soporte. Las propiedades pueden influenciar el micromezclado cerca de la superficie y en la corrosión del material. Algunos metales pueden desprender compuestos tóxicos inhibiendo el desarrollo de la biopelícula.

En las películas biológicas, la materia orgánica es absorbida y metabolizada por las capas externas de microorganismos. Uno de los problemas que se presentan durante el metabolismo y crecimiento de la colonización de microorganismos es el aumento de las resistencias a la transferencia de masa interfacial y a la difusión intrapartícula de oxígeno y sustrato, que es proporcional al espesor de las biopelículas.

La estructura física, química y biológica de una biopelícula está influenciada por su ambiente. La superficie de la película biológica es altamente adsorbente y puede obtener cantidades significativas de sales, arcilla y otros compuestos en aguas naturales.

Los factores importantes que afectan el desarrollo de la biopelícula son sin duda las tasas de muerte debido a la presencia de compuestos que inhiben la actividad metabólica de los microorganismos, además de la falta de nutrientes o fuentes de carbono. Otro factor que es

importante pero que regularmente no se considera es la separación de porciones de la biopelícula debido a los esfuerzos cortantes del fluido.

El desarrollo de una biopelícula involucra una diversidad de aspectos que dificultan la representación fenomenológica de los procesos que se llevan a cabo en el espesor activo utilizando un modelo matemático. En la mayoría de los trabajos reportados en la literatura se describe a la biopelícula mediante modelos de difusión-reacción los cuales suponen que el espesor activo permanece constante. Lo anterior no necesariamente es cierto a pesar de que se tiene una tasa de muerte, por falta de fuentes de carbono o por autólisis, sin contar con una tasa de desprendimiento celular debido a los esfuerzos cortantes del fluido (Atkinson et al, 1968; Lewandowski et al, 1991; Skowlund y Kirmse, 1988; Leyva-Ramos et al, 1989). Se han reportado diferentes trabajos donde se afirma un crecimiento acelerado de la película activa en reactores que utilizan una membrana (Freitas dos Santos y Livignston, 1995).

Otros autores consideran solamente un cierto espesor de la película biológicamente activo. En esta región se llevan a cabo los procesos de difusión-reacción y metabolismo no habiendo actividad en las capas más internas.

Los modelos de difusión están descritos en términos de la Ley de Fick y los cinéticos por la ecuación de Monod; estos a veces incluyen términos de inhibición por sustrato y productos. El describir adecuadamente el comportamiento de la biopelícula incluiría construir modelos donde el espesor varia con el tiempo, es decir, que se tendría un modelo con frontera móvil que sería difícil de resolver numéricamente. Una característica de los espesores biológicamente activos es el desprendimiento de porciones de células debido a los esfuerzos de corte; en trabajos recientes se ha tratado de describir este efecto mediante un modelo matemático (Stewart, 1992).

La mayoría de los autores agrupan los fenómenos de desprendimiento por esfuerzos cortantes y envenenamiento celular mediante un término denominado de muerte el cual se adiciona en el modelo matemático. Este parámetro se mide experimentalmente y agrupa una serie de simplificaciones que reducen la dificultad para describir realmente el comportamiento de la biopelícula mediante un modelo matemático. La siguiente ecuación representa los fenómenos de difusión-reacción y el término de muerte

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - \frac{1}{Y_A} \left[ \mu_{\text{máx}} \frac{C_A}{K_A + C_A} X - k_d X \right] \quad (1.1)$$

$C_A$  es la concentración de la especie A,  $k_d$  es el término de muerte el cual agrupa inhibición por sustrato y/o producto, y desprendimiento celular por esfuerzos cortantes.

## 1.4 CONFIGURACIONES Y APLICACIONES DE REACTORES BIOLÓGICOS.

### 1.4.1 REACTORES POR LOTE.

Las configuraciones básicas de reactores biológicos se muestran en la Fig. 1.2. El más simple es el reactor por lote (Fig. 1.2 a). En este caso, los nutrientes son adicionados al cultivo microbiano. El producto obtenido es removido al finalizar la operación, generalmente cuando la concentración de sustrato es cercana a cero.

En años recientes los reactores de tanque agitado han llegado a ser los sistemas más usados para fermentaciones líquidas. La presión, el volumen del fermentador, pH, velocidad de agitación, flujo de aire, producción de  $\text{CO}_2$ , consumo de  $\text{O}_2$ , y la temperatura son los parámetros que se miden en la fermentación.

### 1.4.2 REACTORES CONTINUOS.

En procesos continuos todos los nutrientes son continuamente adicionados al reactor. Los reactores continuos más utilizados son los de tanque agitado (RCTA) y los tubulares (RT). La diferencia fundamental entre los dos diseños se da en el grado de mezclado del fluido que caracteriza la forma y el tamaño del reactor. En el caso de los RCTA (Fig. 1.2 b), se tiene un mezclado perfecto de la fase líquida, burbujas de gas o ambos. Este patrón de flujo permite considerar un sistema homogéneo durante todo el tiempo. El flujo de líquido a través de un RT (Fig.

1.2 c), generalmente puede ser clasificado como flujo pistón donde la velocidad del fluido es independiente de la posición radial. Idealmente, no existe mezclado axial y todos los elementos del fluido toman el mismo tiempo para atravesar la longitud del reactor. Cada elemento de fluido es tomado como un reactor por lote, con la composición de la fase reaccionante cambiando conforme avanza a través de la longitud del tubo (Levespiel, 1972; Characklis, 1983).

Cuando se considera que los dos diseños básicos anteriores pueden ser los mejores, para un proceso de eliminación de aguas de desecho o fermentación, la elección de uno de ellos podría estar basada en el balance entre los costos de inversión, de operación, mantenimiento y ambiente óptimo fisicoquímico para la actividad del biocatalizador. Eligiendo el diseño apropiado, este puede ayudar a crear un ambiente óptimo para la conversión biológica y reducir los costos de perdidas de producto o biomasa.

La concentración de sustrato de un RCTA operando bajo condiciones en estado estable, es decir donde ya no se observan cambios en la concentración, a una tasa de dilución menor al máximo crecimiento es característicamente menor e independiente del tiempo. Así, el uso de un RCTA es ventajoso cuando existen procesos donde hay inhibición por sustrato.

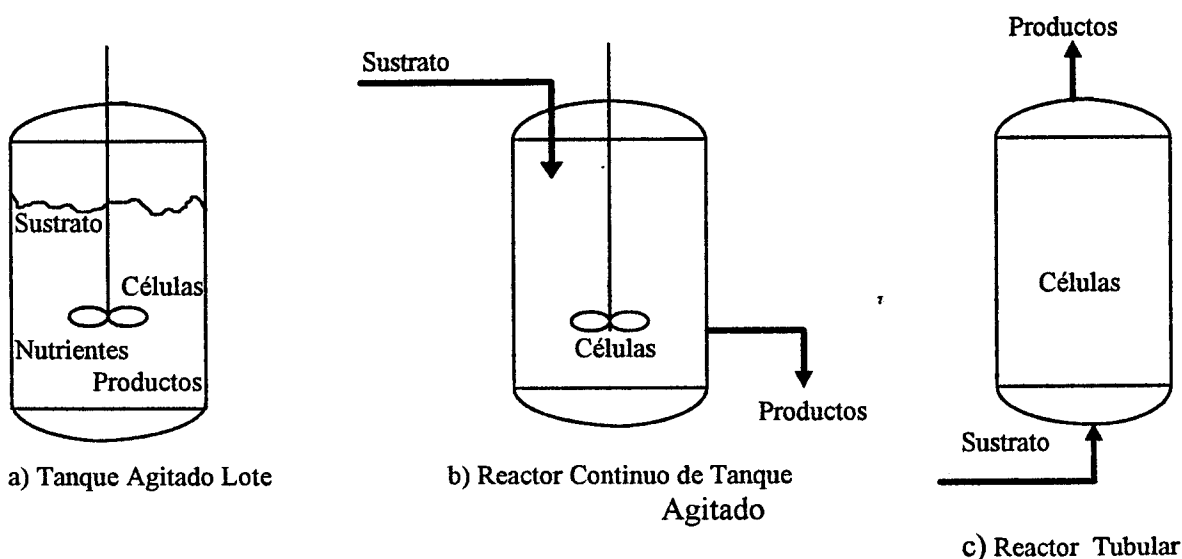


Fig. 1.2. Configuraciones Generales de Biorreactores

## 1.5 FENÓMENOS DE TRANSPORTE EN UN REACTOR BIOLÓGICO

### 1.5.1 RUTA FÍSICA DE LOS PROCESOS DE TRANSPORTE EN REACTORES BIOLÓGICOS.

Una representación física generalizada de un biorreactor que involucra dos o tres fases puede ser observada en la Fig. 1.2. Esta representación puede ser aplicada en fermentaciones aeróbicas en donde los microorganismos utilizan oxígeno y otros nutrientes disueltos para crecer.

Existen ocho resistencias a la transferencia de masa como se indica en la ilustración : (1) en la película de gas; (2) en la interfase gas-líquido; (3) En la interfase gas-líquido del lado de la película de líquido; (4) en el líquido; (5) en la película del líquido cubriendo al sólido; (6) en la interfase líquido-sólido; (7) en la fase sólida que contiene al biocatalizador y (8) la reacción bioquímica (Moo Young y Blanch, 1989).

La mayor resistencia en un reactor biológico se presenta en la fase líquida y esta controla la transferencia de masa global interpartícula. Las cuatro resistencias en la fase líquida son usualmente controlantes de todo el proceso:

i) Resistencia en la fase líquida cerca de la interfase gas-líquido; esta resistencia frecuentemente controla la tasa de disolución de oxígeno en el proceso.

ii) Resistencia en la fase líquida en el seno del medio acuoso separando las fases dispersas; esta resistencia generalmente es eliminada proporcionando un mezclado adecuado.

Resistencia interfacial :

iii) Resistencia en la fase líquida cerca de la interfase líquido-sólido: esta resistencia puede ser significativa debido a una baja diferencia entre las densidades del medio acuoso y la fase dispersa

iv) Resistencia líquida dentro de la fase sólida dispersa, esta resistencia puede ser significativa en empaques catalíticos y medios porosos.

---



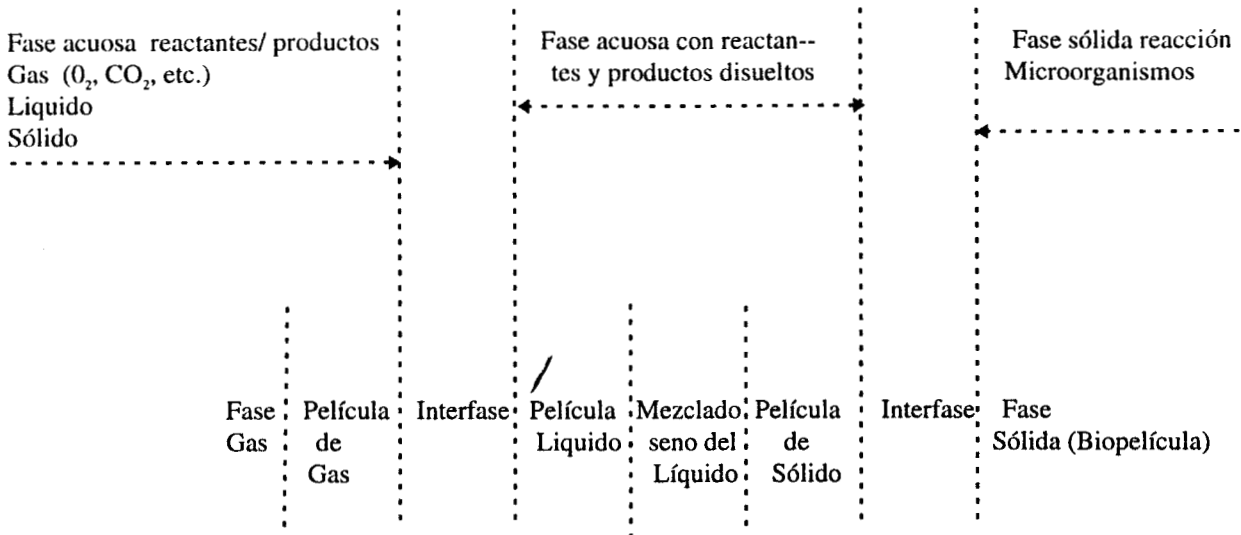


Fig. 1.3 Esquema generalizado de los procesos de transferencia de masa y calor en un biorreactor de tres fases.

### 1.5.2 TRANSFERENCIA DE OXÍGENO Y COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA

En los procesos de fermentación aeróbios es necesario un suministro adecuado de oxígeno que satisfaga los requerimientos metabólicos de los organismos empleados. La oxidación de la fuente de carbono y su transformación en células, productos y CO<sub>2</sub> establece una demanda de oxígeno que es esencial satisfacer a través de la aeración y el mezclado del cultivo. Es necesario conocer los requerimientos de oxígeno del cultivo para asegurar que su suministro sea suficiente. Cuando se evalúa la transferencia de oxígeno en un proceso de oxidación biológica es necesario calcular las resistencias a la transferencia que encuentra el oxígeno antes de llegar a la célula. Se ha demostrado que la resistencia mayor la ofrece la película de líquido que rodea la burbuja. En la biopelícula, la difusión a través de esta es el paso controlante (Quintero, 1981).

El coeficiente de transferencia de masa puede ser definido por un balance de masa para el oxígeno en un reactor biológico. Considerando el oxígeno en las burbujas de gas que ascienden a través de la dirección axial del reactor, la tasa de transferencia de oxígeno en la interfase gas-líquido  $N_a$  esta dada por :

$$N_a = k_L a (C_g^* - C_L) \quad (1.2)$$

donde  $C_L$  es la concentración local de oxígeno disuelto en el seno del líquido en algún tiempo  $t$ ,  $C_g^*$  es la concentración de oxígeno en el líquido en la interfase gas-líquido a un tiempo infinito, que equivale a la concentración de saturación,  $a$  es el área interfacial;  $k_L$  es el coeficiente de transferencia de masa local.

En la ecuación 1.2 la tasa de transferencia de masa depende del coeficiente de transferencia, el área interfacial y la concentración. El área interfacial es controlada por factores tales como el tamaño de burbuja y la velocidad de agitación, mientras que la concentración interfacial es afectada por la temperatura y las presiones parciales (Ley de Henry), (Moo Young y Blanch, 1989).

Las concentraciones interfaciales usualmente no son medibles, la aproximación común es usar el coeficiente global de transferencia de masa,  $K_L$ , y la concentración de oxígeno en el seno del gas en vez del valor en la interfase. Debido a que la mayor resistencia se encuentra en la película líquida se ha demostrado que  $K_L$  es aproximadamente igual a  $k_L$ .

Existen técnicas experimentales para medir el término  $k_L a$ . Los métodos mas usados son el Método Dinámico de llenado y el Método de Oxidación de Sulfito. Es más común encontrar correlaciones empíricas para estimar  $k_L a$ . El número de correlaciones publicadas para sistemas de aeración microbiológicos son grandes. Estas correlaciones pueden ser difíciles de usar ya que han sido producidas a partir de experimentos con configuraciones particulares y un rango específico de parámetros y condiciones de operación. Alguna estimación podría ser valida solo si se utilizara un sistema experimental, condiciones de operación y parámetros similares.

El coeficiente de transferencia de masa depende de la fracción de gas, y en general las correlaciones de  $k_L a$  son de la forma:

$$k_L a = b U_G^n \quad (1.3)$$

donde  $b$  y  $n$  son números constantes que dependen de las condiciones del sistema y  $U_G$  es la velocidad del gas. Andrew (1982) ha propuesto una ecuación como condición limite para

transferencia de oxígeno dentro de los cultivos que tienen una viscosidad similar a la del agua. A partir de esta ecuación se pueden calcular valores de  $k_L$  de acuerdo con :

$$\left( \frac{k_L a}{\epsilon_G} \right) = 0.4 \text{ s}^{-1} \text{ (a } 20 \text{ }^\circ\text{C)} \quad (1.4)$$

donde  $\epsilon_G$  es la fracción volumétrica de gas, la cual es proporcional a la velocidad del gas. El efecto de la temperatura en la correlación anterior no se conoce. En ausencia de datos experimentales, se sugiere que  $k_L a / \epsilon_G$  es afectada de la misma forma que  $k_L$  para la sistemas gas-líquido en columnas empacadas. El incremento de  $k_L a / \epsilon_G$  con respecto a la temperatura es de 1.025 por cada grado Kelvin incrementado (Andrew, 1982; Metcalf y Eddy, 1991). De tal forma que para 30 °C se tiene

$$\left( \frac{k_L a}{\epsilon_G} \right) = 0.512 \text{ s}^{-1} \text{ (30 }^\circ\text{C)} \quad (1.5)$$

La correlación de Akita y Yoshida, que se muestra en la siguiente ecuación, predice el valor de  $k_L a$  en columnas de burbujeo de diferente tamaño (Akita y Yoshida, 1974; Shah et al., 1982; Kawase et al, 1991).

$$\frac{k_L a D_C^2}{D_1} = 0.6 \left( \frac{v_L}{D_1} \right)^2 \left( \frac{g D_C^2 \rho_L}{\sigma} \right)^{0.62} \left( \frac{g D_C^3}{v_L^2} \right)^{0.31} \epsilon_G^{1.1} \quad (1.6)$$

Esta correlación fue desarrollada para varios sistemas gas-líquido incluyendo aire-agua, con los siguientes rangos de parámetros:  $0.003 \leq U_G \leq 0.4 \text{ m s}^{-1}$ ,  $0.152 \leq D_C \leq 0.6 \text{ m}$ ,  $0.126 \leq H_L \leq 0.35 \text{ m}$ ,  $800 \leq \rho_L \leq 1600 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $0.00058 \leq \mu_L \leq 0.021 \text{ Pa s}$ ,  $0.022 \leq \sigma_L \leq 0.0742 \text{ N m}^{-1}$ .

Sustituyendo estos parámetros en la ecuación 1.5 se obtiene :

Para columnas de burbujeo se utiliza (Shah et al., 1982)

$$k_L a = 1.174 U_G^{0.82} \quad (20 \text{ }^\circ\text{C}) \quad (1.8)$$

y

$$k_L a = 1.503 U_G^{0.82} \quad (30 \text{ }^\circ\text{C}) \quad (1.9)$$

En las ecuaciones 1.8 y 1.9 se observa una diferencia de casi 4 veces, esto refleja una incertidumbre a cerca de cual correlación utilizar. Cuando se utilice una u otra correlación se tienen que tener cuidado de elegir la que represente mas cercanamente el sistema que se va a modelar pues de lo contrario se pueden tener errores en los resultados esperados.

En cuanto a los coeficientes de transferencia de masa líquido-sólido existen correlaciones basadas en la teoría de la película que tienen la siguiente forma general (Livingston y Chase, 1990; Calderbank, 1960).

$$\frac{k_L a}{a D_i} = 2.0 + C_1 \text{Re}^n \text{Sc}^m \quad (1.10)$$

donde Re es el numero de Reynolds y Sc es el numero de Schmidt.  $C_1$ , n y m son constantes que dependen de la geometría del soporte catalítico y de las características físicas y químicas del medio líquido.

## **CAPITULO 2**

# **MODELOS DE CRECIMIENTO PARA MICROORGANISMOS**

Un modelo es la cuantificación de un proceso físico al cual se le quiere hacer una predicción de su comportamiento. El modelo matemático de un proceso es un sistema de ecuaciones cuya solución representa una respuesta del proceso dando parámetros específicos de entrada. Existen tres tipos de modelos matemáticos, modelos fundamentales que se obtienen a partir de teorías de procesos lógicos; modelos empíricos, que se obtienen a partir de observaciones que describen un experimento y modelos analógicos los cuales utilizan ecuaciones de sistemas similares al proceso que se quiere modelar (Denn, 1986).

La razón de usar modelos matemáticos es obtener, a partir de la solución de un sistema de ecuaciones, el comportamiento esperado del proceso que se modela para un rango de parámetros de entrada y condiciones de operación dados.

---

## 2.1 MODELOS DE CRECIMIENTO MICROBIANO

Los microorganismos requieren para su crecimiento de fuentes de energía y materia. En la mayoría de los procesos biológicos estas fuentes son las mismas. Una vez que se proveen todos los nutrientes necesarios a los microorganismos, estos los transforman en células y/o productos, a este proceso se le denomina metabolismo.

### 2.1.1 Fases de Crecimiento.

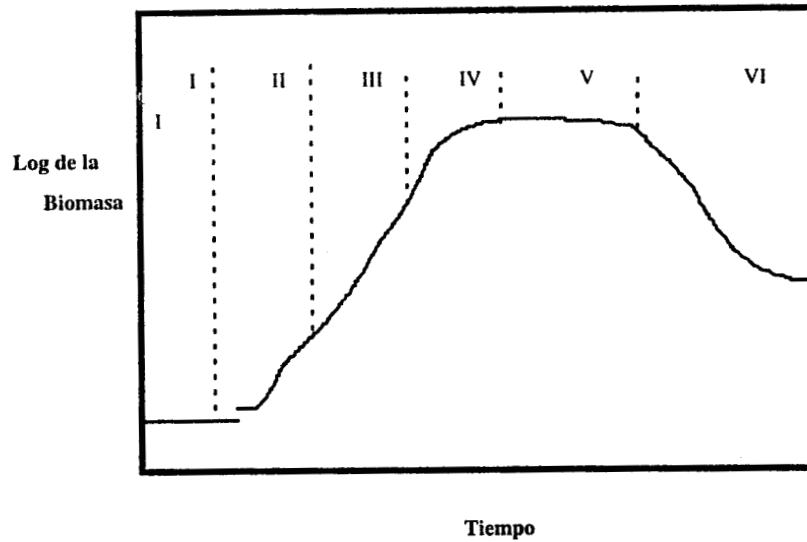
En un cultivo microbiano todas las partes están sujetas a las mismas condiciones de temperatura, pH, concentración de nutrientes, etc. En la Fig. 3.1 se indican las diferentes fases en las que ocurre un cultivo en las condiciones anteriores; estas fases indican cambio en la biomasa y en el medio ambiente. Después de un periodo de retardo, el crecimiento ocurre a la máxima rapidez y finalmente cesa, ya sea por carencia de un nutriente o por la acumulación de un producto inhibitorio o algún cambio en el ambiente físico-químico. Cuando la biomasa alcanza su máximo, aparece generalmente una fase estacionaria durante la cual la biomasa permanece constante; después esta disminuye como consecuencia del metabolismo de mantenimiento o por autólisis.

La duración de la fase exponencial depende parcialmente de la concentración inicial de un sustrato limitante; lo anterior implica que el cultivo pasa de un estado en el cual crece con exceso de sustrato a otro de carencia de sustrato.

### 2.1.2 Ecuación de Monod.

Cuando el crecimiento de los microorganismos solo esta limitado por la cantidad inicial de un sustrato, la curva de crecimiento puede expresarse en función de los parámetros de crecimiento. La ecuación de Monod (1942) describe la relación entre la velocidad específica de crecimiento,  $\mu$ , y la concentración del nutriente limitante, S, en un cultivo microbiano. De hecho la ecuación de Monod es un caso particular de la ecuación de Michaelis-Menten (Bailey y Ollis, 1986).

---



- |                                |                    |
|--------------------------------|--------------------|
| I. retardo                     | IV. desaceleración |
| II. aceleración de crecimiento | V. estacionario    |
| III. crecimiento exponencial   | VI. declinación    |

Fig. 2.1 Curva de crecimiento típica para un cultivo microbiano

La ecuación de Monod que expresa el crecimiento de microorganismos :

$$\frac{dx}{dt} = \mu x \quad (2.1)$$

$$\mu = \frac{\mu_{máx} \times S}{K_s + S} \quad (2.2)$$

$\mu$  es la tasa de crecimiento celular y  $x$  es la concentración de biomasa. La ecuación (2.2) esta representada en la Fig. 2.2 en donde  $\mu$  se gráfica en función de la concentración de sustrato. El valor de  $K_s$  se obtiene cuando  $\mu = 0.5\mu_{máx}$ . Generalmente los valores de  $K_s$  son del orden de  $10^{-5}$  M.

En general, la relación de Monod se cumple aunque hay desviaciones cuando la velocidad de crecimiento es alta (Quintero, 1981).

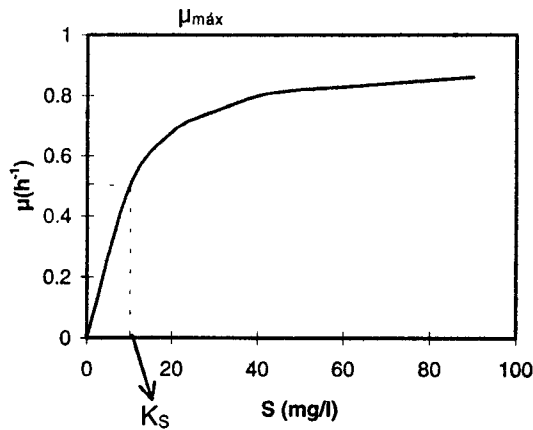


Fig. 2.2 Ecuación de Monod, donde  $\mu_{máx} = 1.0 \text{ h}^{-1}$  y  $K_s = 10 \text{ mg/l}$ .

### 2.1.3 Efectos de la temperatura.

La temperatura afecta el crecimiento de manera notable, principalmente porque los microorganismos de una especie dada solo pueden crecer en un rango restringido de temperatura.

Los microorganismos se pueden clasificar de acuerdo a la temperatura de operación. Los psicrófilos presentan un rango de 5 a 15 °C, los mesófilos de 25 a 40 °C y los termófilos de 45 a 60 °C. Se han reportado casos hasta de 94 °C. Los organismos termófilos tienen un gran potencial de utilización pues la alta temperatura permite tener velocidades de reacción mayores y menor posibilidad de contaminación, aunque aparecen problemas para la transferencia de calor. La mayor parte de los microorganismos que se utilizan actualmente pertenecen al grupo de los mesófilos.

La dependencia de la velocidad específica de crecimiento  $\mu$ , respecto a la temperatura puede expresarse como una ecuación de tipo Arrhenius (Bailey y Ollis, 1986) :

$$\mu = A e^{-E_a/RT} \tag{2.3}$$

donde

- |                               |  |
|-------------------------------|--|
| $E_a$ = energía de activación | $R$ = constante de la Ley de los Gases |
| $A$ = factor de frecuencia    | $T$ = temperatura absoluta             |



La temperatura también afecta el rendimiento  $Y_{x/s}$ . El rendimiento se define como la cantidad de células formadas entre la cantidad de sustrato consumido como se verá más adelante.

Otra forma de expresar la dependencia de  $\mu$ , respecto a la temperatura es :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\mu_{máx}(T)s}{K_s(T) + s} x \quad (2.4 \text{ y } 2.5)$$

$$\frac{ds}{dt} = -\frac{\mu_{máx}(T)s}{Y_{x/s} [K_s(T) + s]} x$$

### 2.1.4 Efecto del pH.

El pH, medida de la concentración de los iones hidrogeno, tiene también un marcado efecto en la velocidad de crecimiento y el rendimiento. El pH para una especie presenta generalmente un máximo denominado pH óptimo. En bacterias el pH óptimo varía entre 6.0 y 8.0; en levaduras entre 4.0 y 6.0 y en mohos entre 3.0 y 7.0. La ecuación de Monod ha sido modificada para indicar el efecto del pH en  $\mu$  (Andreyeva y Biryukov, 1973) :

$$\mu = \frac{\mu_{máx} s}{K_s \left( 1 + \frac{K_a}{H_1} + \frac{H_1}{K_b} \right) + s} \quad (2.6)$$

donde  $H_1$  es la concentración de iones hidrogeno, y  $K_a$  y  $K_b$  son las constantes de disociación :

$$pH \text{ óptimo} = \sqrt{K_a K_b} \quad (2.7)$$

sin embargo, la ecuación (2.6) y (2.7) solo son validas en un cierto rango de pH y no necesariamente se cumplen en la practica (Quintero, 1981).

### 2.1.5 Modelos cinéticos de crecimiento.

El crecimiento de microorganismos esta limitado por la cantidad de sustrato suministrado inicialmente, puede ser expresado en términos de la concentración celular  $x$ , la del sustrato limitante  $s$  y la de un inhibidor  $I$ . También deben de considerarse que las condiciones de temperatura, fuerza iónica y pH se establecen al principio del proceso de reacción biocatalítica, y es probable que varíen durante el transcurso de la misma, a no ser de que se controlen externamente; lo anterior puede tener un efecto notable en el crecimiento celular. Una expresión general es :

$$\frac{dx}{dt} = f(x, s, I, T, pH, \dots etc.) \quad (2.8)$$

La ecuación de Monod es un modelo de crecimiento celular

$$\frac{dx}{dt} = \mu_{má} x \frac{s}{K_s + s} \quad (2.9)$$

donde  $dx/dt$  es la velocidad de crecimiento.

En la mayoría de los procesos de eliminación biológica aparecen sustratos que son compuestos inhibitorios, es decir que des-aceleran la velocidad de crecimiento y por la tanto el rendimiento de la reacción. En este caso se deben utilizar modelos inhibitorios para describir el comportamiento de los microorganismos en la superficie de la biopelícula del reactor. El modelo que se utiliza con mayor frecuencia para presentar inhibición por sustrato es el modelo propuesto por Andrews

$$\mu = \mu_{má} x \frac{s}{K_s + s + \frac{s^2}{K_i}} \quad (2.10)$$

Levenspiel (1987) propone un modelo de inhibición de producto

$$\mu = \mu_{máx} \frac{s}{K_S + s} \left(1 - \frac{P}{P_L}\right)^n \tag{2.11}$$

donde  $P_L$  es la concentración de producto máxima por encima de la cual no hay crecimiento,  $n$  es constante. Luong (1987) propone un ecuación para inhibición de sustrato

$$\mu = \mu_{máx} \frac{s}{K_S + s} \left(1 - \frac{s}{S_L}\right)^n \tag{2.12}$$

$S_L$  es la concentración límite del sustrato, mas arriba de esta concentración el crecimiento esta completamente inhibido,  $n$  es una constante que generalmente toma el valor de 1. La Fig. 2.3 muestra el comportamiento del crecimiento para los modelos con inhibición.

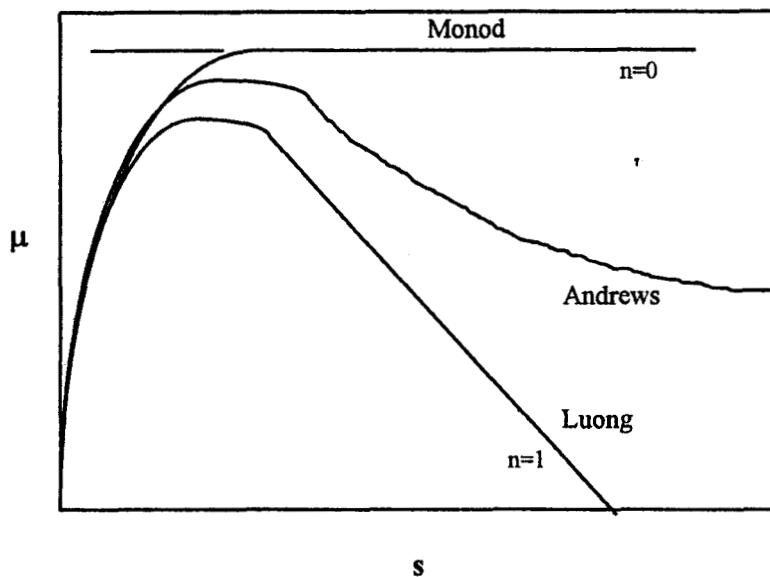


Fig. 2.3 Representación gráfica del comportamiento en el crecimiento para diferentes modelos de crecimiento con inhibición de sustrato.

El crecimiento depende de la concentración de sustrato limitante, un balance de sustrato podrá establecer la cantidad de nutrientes que necesita la biomasa para crecer. En el balance de

sustrato se tiene que hacer uso de una constante llamada coeficiente de rendimiento para sustrato y se define como (Bailey y Ollis, 1986) :

$$Y_{x/s} = \frac{\text{masa de células formadas}}{\text{masa de sustrato consumido}} \quad (2.13)$$

El balance para sustrato es

$$\frac{ds}{dt} = -\frac{dx}{dt} \frac{1}{Y_{x/s}} - mx \quad (2.14)$$

a bajas concentraciones, la ecuación de rendimiento debe incluir un factor que tome en consideración la utilización de cierta cantidad de sustrato para mantenimiento,  $m$  es la velocidad específica de consumo de sustrato para mantenimiento.

## 2.2 SOBRE LOS TRABAJOS REALIZADOS.

En la mayoría de los trabajos publicados hasta el momento se han realizado estudios de los fenómenos que ocurren en la biopelícula, estos fenómenos están asociados con resistencias a la transferencia de masa por difusión y reacción bioquímica. Gooijer et al. (1991) describe un modelo de crecimiento que incluye resistencias difusionales dentro y fuera de la biopelícula; ellos realizan simplificaciones despreciando las resistencias externas teniendo como producto final un modelo simplificado que describe los fenómenos de difusión-reacción dentro de la biopelícula. El modelo que presenta Gooijer et al. (1991) es utilizado para comparar valores experimentales encontrándose una buena aproximación con los resultados numéricos; ellos realizan además un análisis de sensibilidad paramétrica concluyendo que el parámetro más sensible es el coeficiente de transferencia de masa externa, por lo tanto la resistencia a la transferencia interfacial no es despreciable.

Melick et al. (1987) propone por su parte un modelo de difusión-reacción para la producción de etanol en un fermentador de lecho empacado. Este modelo se describe un patrón de flujo de tipo pistón. El fenómeno que limita el proceso es la difusión en la biopelícula y los resultados que se predicen tienen un error del 40 %.

Saéz y Rittman (1988) plantean un modelo en estado estacionario que describe el flux de masa dentro de la biopelícula. Ellos resuelven las ecuaciones planteando una solución pseudoanalítica que se basa en un análisis de resultados numéricos de ecuaciones diferenciales; el modelo al igual que los anteriores plantea resistencias difusivas y cinéticas. Los resultados obtenidos por Saéz y Rittman (1988) son comparados con resultados numéricos obtenidos por otros autores, es decir, no se hace una comparación con resultados experimentales. Un trabajo similar al anterior es el realizado por Wagner y Hempel (1988) donde se hace un estudio de los efectos de la limitación por difusión en la degradación de sulfonato alquilnaftaleno. El modelo considerada la existencia de dispersión radial para sustrato y oxígeno.

Skowlund y Kirse (1989) plantean dos modelos, uno para concentraciones moderadas y otro para concentraciones elevadas. En el primer modelo considera resistencias externas, es decir, la difusión dentro de la biopelícula es despreciable, el segundo modelo considera que las resistencias internas dominan el proceso. Los modelos están basados en dos consideraciones; a) solo un cierto espesor de la película es biológicamente activa, b) la tasa de reacción biológica es relativamente lenta.

Entre los trabajos que se encargan de hacer un estudio de la dinámica de los biorreactores y que sobresalen por su contribución son los efectuados por Worden et al. (1987), Papathanasius et al. (1988) y Okabe y Hirata (1995). En estos trabajos se realiza un análisis del comportamiento dinámico del reactor cuando se implementan cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada del sistema concluyendo que los resultados obtenidos describen adecuadamente las respuestas dinámicas que se tienen en el proceso real.

En los trabajos que se mencionaron anteriormente no se contempla el estudio de los efectos que tiene la hidrodinámica el sistema en el crecimiento de los microorganismos. La hidrodinámica contempla una serie de factores tales como mezclado, difusión o dispersión, convección de una de las especies en una fase, que afectan directamente la eficiencia del biorreactor. Leyva-Ramos et al. (1990) considera que el conocimiento de la hidrodinámica y la reacción global en un biorreactor es

---

fundamental para el diseño de este tipo de sistemas. La tasa global de consumo de sustrato depende de tres pasos que son: difusión de sustrato del líquido a la biopelícula, difusión de sustrato dentro de la biopelícula y la reacción biocatalítica. Cunningham et al. (1995) plantean un modelo en estado estacionario en dos dimensiones que acopla hidrodinámica, transporte y reacción en un sistema de biopelícula con geometría irregular y flujo laminar. El modelo utilizado acopla procesos de flujo, transporte y reacción. El flujo es modelado por las ecuaciones de movimiento de Navier-Stokes acopladas con ecuaciones que describen los procesos de transporte de masa interfacial, por difusión y reacción en un soluto. Los resultados que se obtienen del trabajo de Cunningham et al. (1995) demuestran la importancia de considerar a las cantidades de oxígeno dentro de la biopelícula. La importancia de estas cantidades se debe principalmente a diferencias en el mezclado hidrodinámico tales como patrones causados por la geometría y la superficie irregular de la biopelícula.

En este trabajo se realiza un análisis de la hidrodinámica del sistema a modelar. En la mayoría de los trabajos reportados se plantean balances de materia que describen al sustrato y a la biomasa (Gooijev et al, 1990; Melick et al, 1986; Saéz y Rittman,1987; Skowlund y Kirse, 1988; Wagner y Hemmpel, 1987). En estos trabajos, no se consideran los efectos que tiene la cantidad de oxígeno presente en las tres fases. El modelo que se plantea en el siguiente capítulo describe el comportamiento del sistema en base a la cantidad de oxígeno presente a lo largo del reactor. Debido al interés del estudio hidrodinámico se hará una consideración que simplifica más la representación detallada de la naturaleza biológica de la película. El modelo considera a la biopelícula como un catalizador externamente depositado, es decir, que solo existe actividad metabólica en la superficie externa de la película biológica. Esta consideración plantea una resistencia difusiva interna nula en la biopelícula y una reacción instantánea en la superficie activa.

---

## 2.3 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

A la fecha, se han realizado una cantidad considerable de trabajos que tienen por objetivo el tratar de describir matemáticamente el comportamiento de un reactor biológico que contiene una película inmovilizada de microorganismos.

Los modelos utilizados para describir el comportamiento fenomenológico pueden ser tan complicados o sencillos de resolver dependiendo de la necesidad descriptiva que se requiera. Los balances de materia para sustrato y biomasa consideran dos fases. Cuando se elige como sistema un reactor biológico que utiliza microorganismo aeróbios, es importante considerar al oxígeno como un componente cuya importancia influye en el diseño y escalamiento de este tipo de equipos, además de que se encuentra en tres fases. La fase gas la compone el oxígeno presente en el aire, la fase líquida contiene oxígeno y sustrato de forma disuelta y la fase sólida la compone el agregado celular al que llamamos biopelícula. Un reactor biológico aeróbico es un sistema donde el catalizador biológico requiere de oxígeno para llevar a cabo la oxidación del sustrato o contaminante. La mayoría de los modelos reportados en la literatura, formulan balances para dos fases y dos componentes, el líquido y la película de microorganismos.

En este trabajo se construyó un modelo matemático que permite hacer un estudio de la hidrodinámica de un biorreactor que considera tres componentes, oxígeno, sustrato y biomasa, y tres fases correspondientes gas, líquido y sólido. La biopelícula se considera como un catalizador donde la superficie es la zona de reacción.

La hidrodinámica de estos sistemas juega un papel importante en la eficiencia de este tipo de equipos. Este trabajo contempla principalmente un estudio del comportamiento hidrodinámico de un reactor biológico que considera ciertas cantidades de oxígeno en las tres fases.

Uno de los objetivos de este trabajo es representar mediante un modelo matemático el comportamiento de un equipo experimental utilizado para la eliminación de un compuesto aromático halogenado. Los resultados experimentales fueron reportados por Chavéz-Rivera (1994) en su tesis doctoral.

---

## 2.4 OBJETIVOS

Los objetivos de este trabajo son

General:

Construir un modelo dinámico el cual represente el comportamiento fenomenológico de un reactor biológico de tres fases, mediante balances de materia para sus tres componentes, que permita realizar un estudio de la hidrodinámica del sistema.

Particulares:

1. Estudiar el efecto que tiene el comportamiento hidrodinámico en los microorganismos cuando se utilizan diferentes valores en los parámetros de transporte en la interfase.
  2. Estudiar el comportamiento dinámico del sistema cuando se aplican diversas tensiones externas al sistema tales como cambios en los parámetros de transporte y en las condiciones de operación.
  3. Realizar una comparación de resultados obtenidos a partir de la simulación numérica con datos experimentales reportados en la literatura.
-



## 2.5 DESCRIPCIÓN DEL EQUIPO EXPERIMENTAL

El equipo experimental utilizado por Chávez-Rivera (1994) consiste en un reactor cilíndrico hecho de Perspex<sup>®</sup> con diámetro interno de 0.05 m y cerca de 0.65 m de longitud. El flujo de líquido utilizado dentro del reactor fue del orden de  $700 \times 10^{-6}$  a  $750 \times 10^{-6}$  m<sup>3</sup> y el flujo de aire de  $14.7 \times 10^{-6}$  m<sup>3</sup> s<sup>-1</sup>, equivalente a una velocidad superficial de  $7.5 \times 10^{-3}$  m s<sup>-1</sup>.

El reactor fue empacado con un soporte hecho de Celite<sup>®</sup>. Este soporte fue seleccionado ya que se tiene la experiencia de trabajos desarrollados con anterioridad (Caunt y Chase, 1988; Livingston, 1989).

El Celite<sup>®</sup> está hecho de roca sedimentaria compuesta por esqueletos de algas unicelulares llamadas diatomeas. El principal uso del Celite<sup>®</sup> es como un filtro altamente poroso con estructura no compresible, pero puede ser usado entre otras cosas como un soporte biocatalítico. Este soporte tiene forma de estrella con ocho secciones o picos de aproximadamente 0.030 m de longitud. Las estrellas fueron acomodadas dentro del reactor en cuatro cadenas o columnas las cuales se esquematizan en la Fig. 2.4.

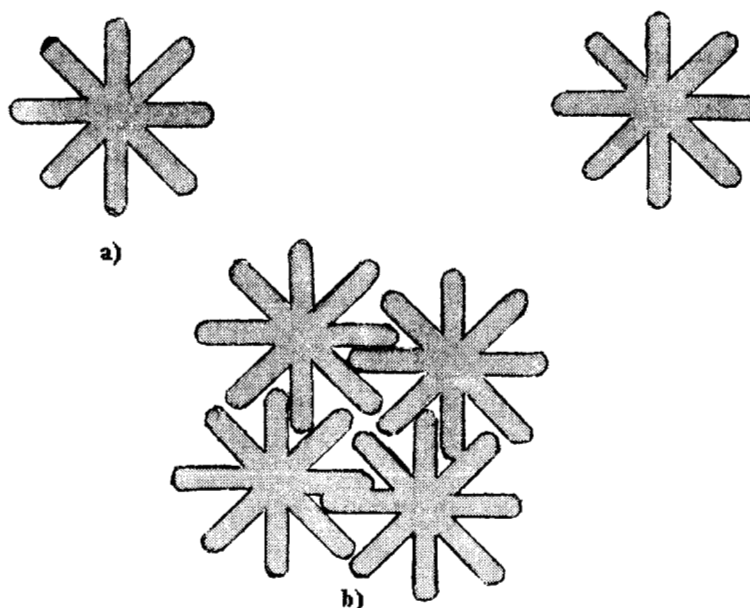


Fig. 2.4 Forma esquemática de una unidad de soporte biocatalítico; a) unidad estrella, b) arreglo de soporte en cuatro cadenas a lo largo del reactor.

Utilizando las estrellas se construyeron cuatro bloques o columnas de unidades biocatalíticas a lo largo del reactor. Cada cadena fue hecha estibando 17 estrellas con goma adhesiva de silicón. Las cuatro cadenas fueron introducidas dentro del reactor. Esta configuración provee al reactor una área específica mayor y de canales estrechos por los cuales se observa el flujo libre de la fase líquida.

El área total expuesta de este empaque fue de aproximadamente  $0.282 \text{ m}^2$  y una área específica de  $281 \text{ m}^{-1}$  con una fracción vacía de cerca de 0.62.

La biopelícula fue desarrollada mediante crecimiento espontáneo en la superficie del soporte biocatalítico. El cultivo utilizado en el trabajo experimental fue desarrollado por InterBio Ltd (UK) y llamado BAH (bacterias para aromáticos halogenados). El cultivo BAH está hecho de cinco *Pseudomonas sp.*, una *Klebsiella sp.*, cuatro *Rhodococci sp.*, y dos cadenas de hongos. La habilidad de esta población es la de degradar un amplio rango de compuestos aromáticos halogenados.

El compuesto aromático halogenado utilizado por Chávez-Rivera (1994) fue 3-4dicloroanilina (34DCA), el cual es un sustrato inhibitorio. Este compuesto fue seleccionado por varias razones :

- i) es un compuesto xenobiótico, es decir, es un compuesto sintetizado por humanos y no está presente en la biosfera de manera natural; es tóxico y resistente a la biodegradación;
- ii) es un compuesto difícil de degradar debido a la estructura aromática y a que contiene dos átomos de cloro;
- iii) es un compuesto que se utiliza para la fabricación de herbicidas y tintes;
- iv) es considerado un compuesto xenobiótico recalcitrante "real", (en comparación con el fenol) por la EEC, ya que causa daños al ambiente marino de la Comunidad (EEC,1976; ECC,1982).

La estructura de 34DCA ( $\text{C}_6\text{H}_3\text{NH}_2\text{Cl}_2$ ) se muestra en la Fig. 2.5. Este compuesto tiene un peso molecular de  $162.02 \text{ kg/kmol}$ , punto de fusión de  $70 \text{ }^\circ\text{C}$  y de ebullición de  $272 \text{ }^\circ\text{C}$ . La solubilidad en agua es de  $730 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  a  $20 \text{ }^\circ\text{C}$ .

La disposición del empaque de Celite® promueve una configuración del reactor del tipo Air Lift de tres fases, donde el flujo de líquido recircula libremente entre los canales formados por las columnas de estrellas.

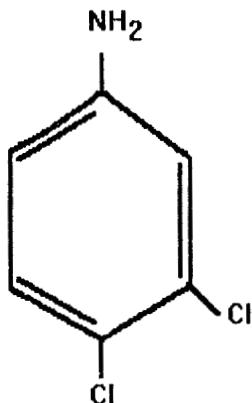


Fig. 2.5 Estructura de la 3-4 Dicloroanilina.

La operación del reactor experimental fue básicamente en condiciones de estado estacionario simulando el comportamiento de un RCTA debido a la recirculación presente en el sistema. La aeración del reactor fue realizada por un difusor de vidrio poroso en forma cónica en el fondo de la cámara del reactor. El difusor provee una mezcla homogénea de pequeñas burbujas de aire, el cual tiene una ventaja para la transferencia de oxígeno.

El reactor experimental fue utilizado para calcular parámetros de transporte, tales como coeficientes de transferencia de masa, y parámetros cinéticos. Los experimentos también consistieron en la realización de corridas en las cuales se vario el flujo de líquido a la entrada del reactor. La concentración de sustrato a la salida fue medido observándose una eliminación promedio de aproximadamente 99% para los diferentes tiempos de residencia utilizados. Se realizó también, un análisis del comportamiento dinámico del sistema cuando se aplican cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada y en el tiempo de residencia.

## **CAPITULO 3**

# **MODELO MATEMATICO**

### **3.1 REACTORES BIOLÓGICOS CON FLUJO DE AIRE ASCENDENTE.**

El sistema utilizado para la construcción del modelo consiste en un reactor biológico tipo aire ascendente de tres fases, (TPAL; de las siglas en ingles Three Phases Air Lift) como se muestra en la Fig. 3.1.

Los reactores de aire ascendente son equipos agitados neumáticamente que dan una corriente de recirculación con patrón cíclico. Este tipo de reactores ofrecen considerables ventajas con respecto a otros sistemas de tres fases, como columnas de burbujeo y lechos fluidizados. Los reactores biológicos de aire ascendente requieren un menor flujo de gas para completar la fluidización, si es que se trata de un biocatalizador suspendido; eliminan zonas estancadas y ofrecen un rápido mezclado. Una importante ventaja es que proveen un patrón de flujo uniforme que favorece las condiciones de escalamiento y operación industrial (Douek et al, 1993).

---

Este tipo de reactores biológicos tienen una configuración en cuatro secciones con diferentes características de flujo :

1. Tubo Elevador. El gas es esparcido por medio del plato distribuidor y el flujo es predominantemente hacia arriba en forma de flujo tipo pistón.

2. Tubo Concéntrico de Retorno. Es paralelo al tubo elevador y conecta el flujo de la mezcla gas-líquido hacia arriba con el flujo en dirección hacia abajo. El patrón de flujo en el tubo de retorno se puede considerar igual al de un reactor perfectamente mezclado, ya que la recirculación proporciona este tipo de patrón para el flujo de gas.

3. Zona de Regreso Superior. Conecta el flujo proveniente del elevador con el tubo de retorno proporcionando la recirculación de la fase líquida. Esta zona se considera la de mayor mezclado.

4. Zona de Regreso Inferior. Conecta el flujo del tubo de retorno con el tubo elevador (Douek et al, 1993).

---

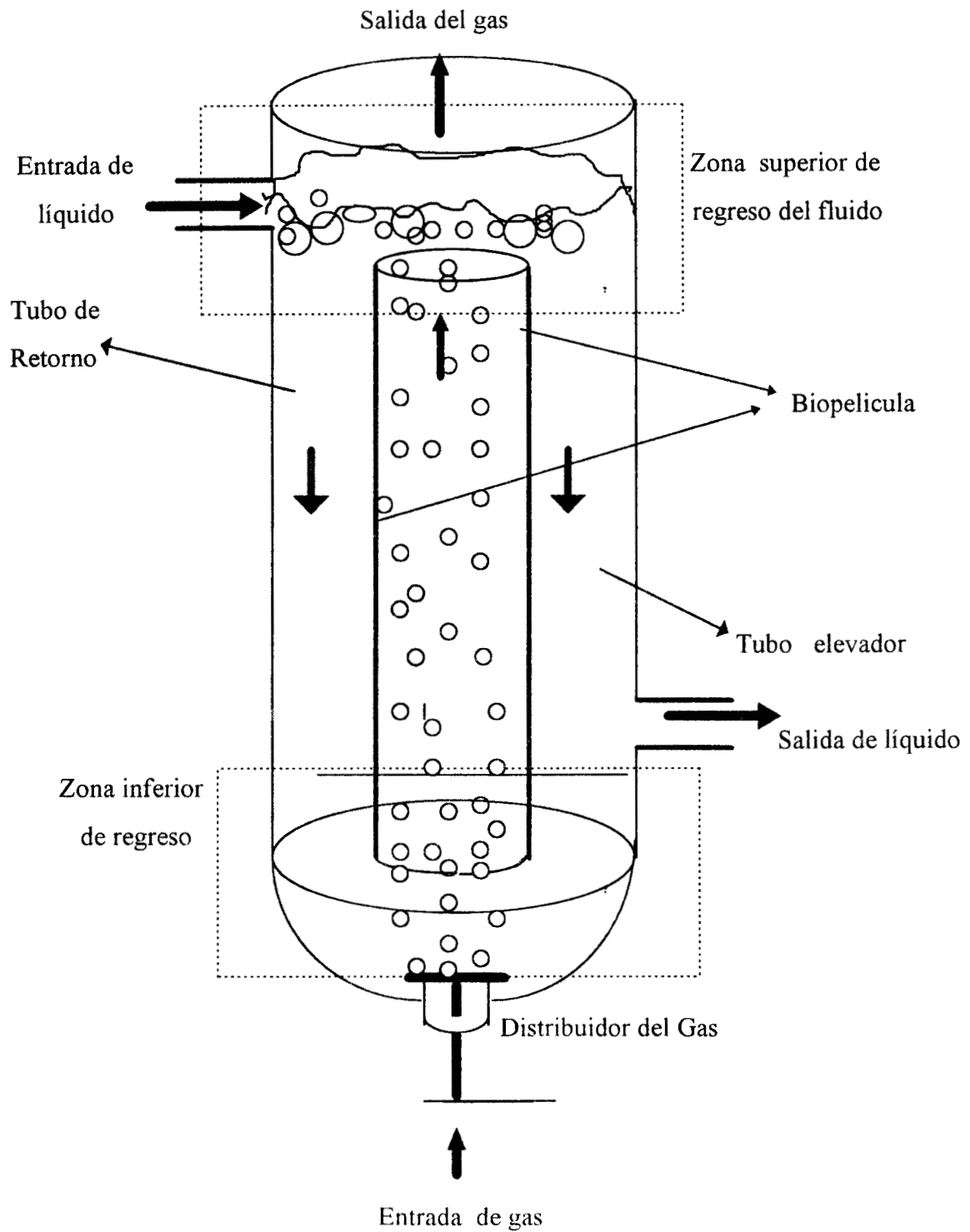


Fig. 3.1 Esquema de un reactor biológico air-lift de tres fases.

## 3.2 MODELO MATEMÁTICO : REACTOR BIOLÓGICO DE TRES FASES

Un modelo matemático trata de describir el comportamiento fenomenológico de un sistema. Para este trabajo, el modelo trata de representar la configuración del reactor utilizado por Chávez-Rivera (1994). El modelo está descrito por los balances de masa para las especies que están involucradas en el proceso. En el caso del reactor biológico de tres fases de aire ascendente (Fig. 3.1), las especies involucradas son oxígeno, sustrato o compuesto contaminante disuelto en la corriente líquida (34 DCA) y biomasa (BAH).

El modelo matemático de un reactor biológico puede ser sencillo o complejo, dependiendo de la necesidad para describir el fenómeno. Generalmente, la dificultad para resolver un modelo matemático es proporcional a la complejidad descriptiva del mismo. Es una práctica común hacer simplificaciones en la descripción del proceso para obtener un modelo sencillo de resolver. Estas simplificaciones o suposiciones deben estar soportadas por principios que dependen de la situación física que se requiere modelar y de un análisis del orden de magnitud relativo de los mecanismos involucrados.

### 3.2.1 Consideraciones para la construcción del modelo.

Para la construcción del modelo se hicieron varias simplificaciones las cuales son:

1. Se considera que los efectos caloríficos son despreciables, es decir, no existen gradientes de temperatura en el reactor biológico. La temperatura es una variable que se controla externamente. En general la reacción bioquímica de la asimilación de sustrato es una reacción exotérmica; existe generación de calor, pero se puede considerar que el calor producido por la reacción biocatalítica es despreciable con respecto al volumen del reactor. También, se puede suponer que el proceso es isotérmico ya que se dispone de una chaqueta de enfriamiento que proporciona una temperatura constante en el proceso. Esta consideración evita plantear balances de energía en el reactor biológico.

---

2. Se considera que la variación de pH del sistema se controla externamente evitando introducir el término en la variación de la concentración de iones hidrógeno, es decir, no se consideran cambios en el pH durante todo el proceso.

3. El oxígeno se encuentra presente en las tres fases. El balance de masa en la fase gas se puede obtener considerando que el régimen de flujo de las burbujas de aire es de tipo pistón, (véase sección 3.1), es decir, existe una variación en la concentración de oxígeno con respecto a la posición axial del reactor biológico. En esta fase se considera, además, que el diámetro de burbuja permanece constante, es decir, no existe coalescencia entre las burbujas de aire. Esta consideración evita tener en el balance un término de difusión efectiva en dirección axial y radial. El oxígeno del aire es transferido por medio de la interfase a la corriente líquida debido a la solubilidad de oxígeno en agua. La concentración de oxígeno en la fase líquida está regida por la solubilidad del gas que se representa mediante la Ley de Henry. Para el balance en la fase líquida se considera que el régimen de flujo es similar al de RCTA. El oxígeno disuelto en la fase líquida finalmente llega a la película biológica, donde los microorganismos toman lo necesario para llevar a cabo el metabolismo celular.

4. El balance de sustrato o contaminante disuelto en la corriente líquida se obtiene al suponer que el patrón de flujo es el de un reactor con mezclado perfecto, es decir, la concentración es constante e independiente de la posición axial y radial del reactor biológico. La ecuación de balance para la biopelícula es similar al del oxígeno en la fase sólida.

5. Una de las consideraciones fuertes que se hacen para la construcción del modelo es que la biopelícula, se considera como un catalizador externamente depositado, es decir, que la reacción de oxidación biológica se verifica solo en la superficie externa de la película biológica. Esta consideración plantea la posibilidad de no tener una resistencia a la transferencia de masa debida a la difusión interna en la biopelícula. La expresión cinética que predice el crecimiento de biomasa se representa mediante la ecuación de Monod con términos de limitaciones por sustrato y oxígeno e inhibición por sustrato de tipo Luong.

6. No existe desprendimiento de biomasa debido a efectos cortantes en la superficie biológica. Además, no se predice un efecto de muerte de microorganismos, es decir, la superficie catalítica tendrá solo acumulación de microorganismos.

---



### 3.2.2 El Modelo Matemático.

Para obtener las ecuaciones de los balances de las especies se toma en cuenta la ecuación general de continuidad para un elemento de volumen de cada una de las fases y que se expresa :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad} \\ \text{acumulada de la} \\ \text{especie A con} \\ \text{respecto del} \\ \text{tiempo} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de A que} \\ \text{entra por unidad} \\ \text{de tiempo} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de A que} \\ \text{sale por unidad de} \\ \text{tiempo} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Cantidad de A} \\ \text{convertida por} \\ \text{unidad de tiempo} \end{array} \right] \quad (3.1)$$

Si la especie A se encuentra en mas de una fase, la ecuación (3.1) es necesaria para cada una de ellas (Froment y Bischoff, 1979). Howell (1983) y Moo-Young y Blanch (1985) proponen un serie de herramientas matemáticas para la construcción de modelos y diseño de reactores biológicos.

En la Fig. 3.2 se puede observar un esquema de los procesos de transferencia de masa en las tres fases. El modelo dinámico no considera los balances de materia para los productos de la reacción; se puede suponer que las cantidades de producto formado son estequiometricamente iguales al de sustrato consumido.

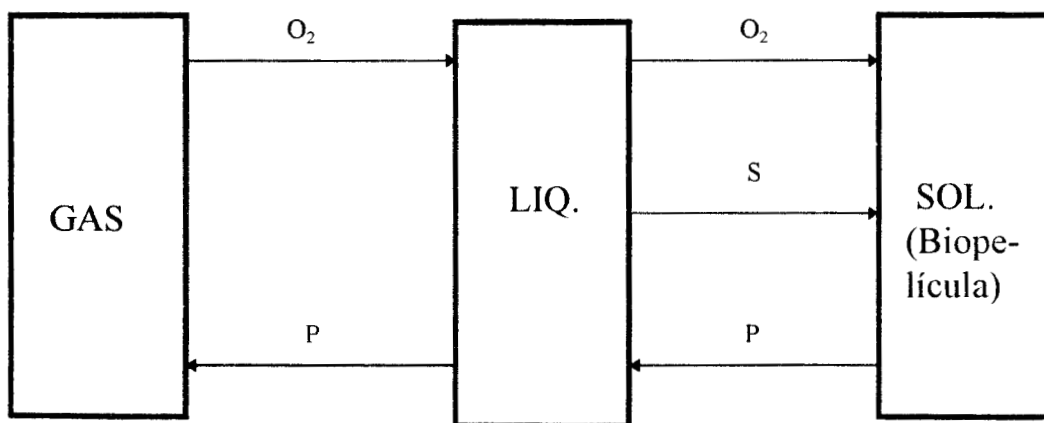


Fig. 3.2. Esquema de los fenómenos de transferencia en las tres fases.

Las ecuaciones del balance para oxígeno son :

Fase Gas.

$$\frac{\partial CO_{2g}}{\partial t} + u_g \frac{\partial CO_{2g}}{\partial z} = - \frac{\epsilon_g}{\epsilon_l} K_{LS} a_{vb} \left( \frac{CO_{2g}}{H} - CO_{2l} \right) \quad (3.2)$$

$$\text{C.I. } t = 0 \quad CO_{2g}(0,z) = CO_{2g}(z)_{eq} > 0$$

$$\text{C.F. } z = 0 \quad CO_{2g}(t,0) = CO_{2g0}$$

El primer termino corresponde al termino dinámico en la concentración de oxígeno en el gas ( $CO_{2g}$ ). El régimen de flujo de oxígeno en esta etapa es predominantemente de tipo pistón esta configuración esta representada con el cambio de concentración de oxígeno en la dirección axial del reactor biológico.  $CO_{2l}^* = CO_{2g} / H$  que corresponde a la concentración al equilibrio utilizando la Ley de Henry,  $a_{vb}$  es el área de transferencia de la interfase gas-líquido cuyo valor es igual a  $\frac{3}{16} Db^{-1}$ . Las concentraciones de oxígeno en esta fase están referidas al volumen del reactor. La condición inicial indica que al tiempo cero, en el arranque del reactor debe existir una cantidad mínima de oxígeno para mantener activado el cultivo inicial. En cuanto a la condición de frontera, a la entrada del reactor esta definida por el valor de la concentración de oxígeno en el aire.

Fase líquida

$$\frac{dCO_{2l}}{dt} = \frac{F}{\epsilon_l V_T} (CO_{2l0} - CO_{2l}) + \frac{\epsilon_g}{\epsilon_l} K_{LS} a_{vb} \left( \frac{CO_{2g}}{H} - CO_{2l} \right) - k_{LS} a_{vLS} (CO_{2l} - CO_{2s}). \quad (3.3)$$

$$\text{C.I. } t = 0 \quad CO_{20} = CO_{2l}(z)_{eq}$$

En esta ecuación se pueden observar los términos que caracterizan al balance para un reactor biológico continuo perfectamente mezclado. El primer término es el término de acumulación de

oxígeno en la fase líquida, seguido de los términos de entrada y salida en el reactor biológico; la ganancia de oxígeno que atraviesa la interfase gas-líquido, y la transferencia de masa en la interfase líquido-sólido.  $CO_{2l}$  es la concentración de oxígeno en fase líquida a la entrada del reactor biológico,  $k_{lS} a_{vIS}$  es el coeficiente de transferencia interfacial líquido-sólido por unidad de volumen,  $F$  es el flujo volumétrico de líquido,  $\epsilon_l$  y  $\epsilon_g$  son las fracciones volumétricas ocupadas de líquido y gas respectivamente, y  $V_T$  volumen total del bioreactor. Las concentraciones son referidas al volumen del reactor.

En la fase sólida:

$$\epsilon_s \frac{\partial CO_{2s}}{\partial t} = \epsilon_l k_{lS} a_{vIS} (CO_{2l} - CO_{2s}) - \mathcal{R}_{O_2}$$

$$\mathcal{R}_{O_2} = - \frac{1}{Y_{X/O_2}} \mathcal{R}_X \tag{3.4}$$

$$\mathcal{R}_X = \mu_{\max} \left( \frac{C_{SS}}{K_S + C_S} \right) \left( \frac{CO_{2s}}{K_{O_2} + CO_{2s}} \right) \left( 1 - \frac{C_{SS}}{C_{S\max}} \right) X$$

$$C.I. \quad t = 0 \quad CO_{2s} = CO_{2s}(z)_{eq}$$

El primer término corresponde al cambio de concentración de oxígeno en la fase sólida con respecto del tiempo seguido de la ganancia debida a la transferencia interfacial y por ultimo el termino de consumo.  $\mathcal{R}_{O_2}$  es la tasa de consumo de oxígeno,  $\mathcal{R}_X$  es la expresión de Monod con limitación e inhibición por sustrato y limitación por oxígeno. La ecuación de inhibición utilizada corresponde al tipo Luong,  $\mu_{\max}$  es la velocidad máxima de crecimiento de la biomasa y  $Y_{X/O_2}$  es el rendimiento en el consumo de oxígeno. En este caso y debido a la consideración de reacción superficial,, las concentraciones de las especies para esta fase son referidas a la superficie de contacto fluido-sólido.

El balance para el sustrato es:

Fase líquida:

$$\frac{dC_{S1}}{dt} = \frac{F}{\epsilon_l V_T} (C_{S1o} - C_{S1}) - k_{1S} a_{v1S} (C_{S1} - C_{SS}) \quad (3.5)$$

C.I.  $t=0$        $C_{S1} = C_{S1}(z)_{eq}$

Al igual que para oxígeno, debe existir una cantidad mínima de sustrato en el tiempo cero para que la biomasa pueda subsistir.

Fase sólida

$$\epsilon_s \frac{dC_{SS}}{dt} = \epsilon_l k_{1S} a_{v1S} (C_{S1} - C_{SS}) - \left[ \frac{1}{Y_{X/S}} \mathfrak{R}_X + mX \right] \quad (3.6)$$

C.I.  $t=0$        $C_{SS} = C_{SS}(z)_{eq}$

donde  $Y_{X/S}$  es el rendimiento para el sustrato, y  $m$  es la velocidad específica de consumo de sustrato para mantenimiento celular.

La cinética microbiana esta representado mediante la ecuación de Monod ampliada para limitación de oxígeno e inhibición de sustrato.

$$\mathfrak{R}_X = \frac{dX}{dt} = \mu_{max} \left( \frac{C_S}{K_S + C_S} \right) \left( \frac{CO_2}{K_{O_2} + CO_2} \right) \left( 1 - \frac{C_S}{C_{Smax}} \right) X \quad (3.7)$$

C.I.  $a$   $t=0$        $X = X_0$

el término de inhibición de tipo Loung se emplea aquí ya que el sustrato que se quiere remover es un compuesto inhibidor. Los resultados experimentales predicen que este compuesto inhibe el crecimiento de biomasa de forma similar a la cinética de Luong (Chavez-Rivera, 1994). La concentración de las especies involucradas son referidas al área superficial de reacción biológica.

### 3.2.3 Modelo Adimensional.

Una practica que es común al desarrollar modelos de procesos es introducir variables adimensionales para acotar el rango de soluciones, generalmente entre cero y uno, y acelerar la convergencia de los resultados numéricos del modelo.

Utilizando como variables de referencia a las concentraciones de oxígeno y sustrato inicial a la entrada del reactor biológico,  $C_{O_{2o}}$  y  $C_{S_o}$  respectivamente, se definen las siguientes variables adimensionales :

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{z}{L} & u &= \frac{C_{O_{2g}}}{C_{O_{2o}}} & v &= \frac{C_{O_{2l}}}{C_{O_{2o}}} & w &= \frac{C_{O_{2s}}}{C_{O_{2o}}} \\ \chi &= \frac{X}{X_o} & S &= \frac{C_{S1}}{C_{S_o}} & r &= \frac{C_{Ss}}{C_{S_o}} \end{aligned} \quad (3.8)$$

El tiempo adimensional está referido al tiempo que tarda una burbuja en atravesar el reactor, suponiendo que la etapa que controla la transferencia de masa es precisamente la absorción del oxígeno en el líquido.

$$t_{ref} = \frac{L}{u_g} \quad \text{entonces} \quad \theta = \frac{t}{t_{ref}} \quad (3.9)$$

Por lo tanto las ecuaciones adimensionales para oxígeno en la fase gas :

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial u}{\partial \xi} = -t_{ref} K_{g1} a_{vb} \left( \frac{u}{H} - v \right) \quad (3.10)$$

$$\text{C.I} \quad \text{a} \quad \theta = 0 \quad u = u_{eq}$$

$$\text{C.F.} \quad \text{en} \quad \xi = 0 \quad u = 1$$

donde  $u_{eq} = C_{O_{2eq}}/C_{O_{2o}}$ .

Para la fase líquida:

$$\frac{dv}{d\theta} = \theta_t [v_o - v] + \theta_{\epsilon_{gl}} t_{ref} k_{gl} a_{vb} \left[ \frac{u}{H} - v \right] - t_{ref} k_{ls} a_{vls} (v - w) \quad (3.11)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad v = v_{eq} \quad v_{eq} = CO_{2eq}/CO_{2o}$$

$$\text{donde } \theta_t = \frac{t_{ref}}{\epsilon_l t_{resid}} \quad t_{resid} = \frac{F}{V_T} \quad \theta_{\epsilon_{gl}} = \frac{\epsilon_g}{\epsilon_l}$$

Para el sólido:

$$\frac{dw}{d\theta} = \theta_{\epsilon_{ls}} t_{ref} k_{ls} a_{vls} (v - w) - \left[ \frac{X_o \mu_{máx} t_{ref}}{\epsilon_s Y_{X/O_2} CO_{2o}} \left[ \frac{S}{K_s + S} \right] \left[ \frac{w}{K_{O_2} + w} \right] \left[ 1 - \frac{S}{S_{máx}} \right] \chi \right] \quad (3.12)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad w = w_{eq}$$

$$\text{donde } \theta_{\epsilon_{ls}} = \frac{\epsilon_l}{\epsilon_s} \quad K_s = \frac{k_s}{C_{So}} \quad K_{O_2} = \frac{k_{O_2}}{CO_{2o}}$$

En el caso del sustrato las ecuaciones adimensionales son:

Para el líquido:

$$\frac{dS}{d\theta} = \theta_t [1 - S] - t_{ref} k_{ls} a_{vls} (S - r) \quad (3.13)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad S = S_{equ}$$

$$\text{donde } S_{equ} = \frac{C_{sequ}}{C_{So}}$$

y para la fase sólida:

$$\frac{dr}{d\theta} = \theta \epsilon_{ls} t_{ref} a_{v ls} (S - r) - \left[ \frac{X_o \mu_{máx} t_{ref}}{\epsilon_s Y_{X/s} C_{So}} \left( \frac{S}{K_s + S} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{S}{S_{máx}} \right) \chi + M\chi \right] \quad (3.14)$$

$$\text{C. I. a } \theta = 0 \quad r = r_{equ}$$

donde

$$r_{equ} = C_{SS}/C_{So} \quad M = \frac{X_o m t_{ref}}{\epsilon_s C_{So}}$$

Para la biomasa

$$\frac{d\chi}{d\theta} = \mu_{máx} t_{ref} \left( \frac{S}{K_s + S} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{S}{S_{máx}} \right) \chi \quad (3.15)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad \chi = 1$$

El modelo adimensional esta representado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales de tipo hiperbólico :

Para oxígeno gas :

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial u}{\partial \xi} = A_1 \left[ \frac{u}{H} - v \right] \quad (3.10)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad u = u_{eq}$$

$$\text{C.F. en } \xi = 0 \quad u = 1$$

líquido:

$$\frac{dv}{d\theta} = A_2 (v_o - v) + A_3 \left[ \frac{u}{H} - v \right] - A_4 (v - w) \quad (3.11)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad v = v_{eq}$$

sólido :

$$\frac{dw}{d\theta} = A_6 (v - w) - \left[ A_5 \left[ \frac{r}{K_s + r} \right] \left[ \frac{w}{K_{O_2} + w} \right] \left[ 1 - \frac{r}{r_{máx}} \right] \chi \right] - M_{O_2} \chi \quad (3.12)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad w = w_{equ}$$

Para el sustrato en el líquido :

$$\frac{dS}{d\theta} = A_2 (1 - S) - A_4 (S - r) \quad (3.13)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad S = S_{equ}$$

En la biopelícula :



$$\frac{dr}{d\theta} = A_6 (S - r) - \left[ A_7 \left( \frac{r}{K_S + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{máx}} \right) \chi + M\chi \right] \quad (3.14)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad r = r_{equ}$$

Para la biomasa

$$\frac{d\chi}{d\theta} = A_8 \left( \frac{r}{K_S + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{máx}} \right) \chi \quad (3.15)$$

$$\text{C.I. a } \theta = 0 \quad \chi = 1$$

donde

$$A_1 = t_{ref} K_{LS} a_{vb}$$

$$A_2 = t_{ref} / t_{res} = \theta_t$$

$$A_3 = A_1 (\epsilon_g / \epsilon_l) = A_1 \theta_{egl}$$

$$A_4 = t_{ref} k_{ls} a_{vls}$$

$$A_5 = \frac{X_0 \mu_{máx} t_{ref}}{Y_{X/O_2} C_{O_2_0}}$$

$$A_6 = A_4 (\epsilon_l / \epsilon_s) = A_4 \theta_{ls}$$

$$A_7 = \frac{X_0 \mu_{máx} t_{ref}}{Y_{X/S} C_{S_0}}$$

$$\text{y } A_8 = \mu_{máx} t_{ref}$$

$A_1$ ,  $A_3$ ,  $A_4$  y  $A_6$  son parámetros similares a el número de unidades de transferencia de masa que se representan como una medida de la dificultad de la transferencia de masa.  $A_2$  es la razón entre el tiempo de referencia y el tiempo de residencia.  $A_2$  representa la velocidad de flujo de líquido entre las velocidad de flujo de gas.  $A_5$  y  $A_7$  representan la cantidad de biomasa producida entre la cantidad de oxígeno y sustrato consumido respectivamente.  $A_8$  es un cociente entre la

velocidad de la reacción biocatalítica y la velocidad del gas que asciende en la dirección axial del reactor.

Como puede observarse, el sistemas de ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas esta acoplado por medio de los términos de transferencia de masa interfacial.

### **3.3 MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUCIÓN PARA EL MODELO EN TRES FASES**

El modelo resultante consiste en un sistema de seis ecuaciones diferenciales parciales de tipo hiperbólico acopladas. Para resolver el sistema de ecuaciones pueden utilizarse tres métodos numéricos : la técnica de las características, colocación ortogonal y un Runge-Kutta de 4o orden.

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas que describe al sistema utilizado en este trabajo tiene tres curvas características que corresponde a dos líneas constantes y una línea recta, (véase apéndice A). Al aplicar el método de las características, el sistema original es reemplazado por un sistema de ecuaciones ordinarias a lo largo de las curvas características (Lapidus, 1962). Este sistema consta de una ecuación diferencial con coordenada espacial y el resto con dependencia temporal. La ecuación diferencial con dependencia espacial es discretizada utilizando el método de colocación ortogonal con seis y doce puntos interiores de colocación utilizando polinomios de Jacobi no simétricos (Villandsen y Michelsen, 1978, Finlayson, 1972, Finlayson, 1980). Finalmente se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como un problema de valor inicial que se integran mediante uno de los métodos de Runge-Kutta de cuarto orden, generalizado para seis variables. (Véase apéndice A). Para integrar el sistema de ecuaciones resultante construyó un código en lenguaje Fortran 77 el cual utiliza seis y doce puntos interiores de colocación.

Para mas detalle acerca del tratamiento numérico realizado para el modelo propuesto en este trabajo refiérase al Apéndice A.

## **CAPITULO 4**

# **RESULTADOS Y DISCUSION**

La simulación es una herramienta poderosa que se utiliza para estudiar el comportamiento fenomenológico de un proceso. La dificultad al resolver los sistemas de ecuaciones que resultan del modelo es proporcional a la complejidad de este. La ventaja de la simulación en computadora es la manipulación de una gran variedad de parámetros y de condiciones de operación del sistema, que permite evaluar y analizar el efecto de cada uno de estos en el comportamiento del reactor de acuerdo a la necesidad del problema a resolver. Por ejemplo, se puede hacer variar el coeficiente de transferencia de masa, la tasa específica de crecimiento microbiano, el diámetro de burbuja o la altura del reactor, el flujo de gas y líquido.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en las simulaciones utilizando parámetros de transporte, cinéticos y condiciones de operación utilizados por Chávez-Rivera, (1994) en su trabajo experimental. Posteriormente se realiza una validación del modelo al comparar los resultados numéricos obtenidos con los experimentales a nivel de planta piloto.

---

## 4.1 DIMENSIONES Y PARÁMETROS DEL REACTOR BIOLÓGICO

El reactor simulado tiene una longitud de 0.65 m con un diámetro interno de 0.05 m. El flujo de aire fue de  $14.7 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$  equivalente a una velocidad superficial de  $7.9 \times 10^{-3} \text{ m s}^{-1}$ . El volumen de líquido en el reactor fue de  $750 \times 10^{-6} \text{ m}^3$ . En la Tabla 4.1 se muestran los parámetros de transporte y cinéticos utilizados para realizar las simulaciones.

Los parámetros cinéticos fueron reportados por Chávez-Rivera (1994) en su trabajo experimental. El coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líquido se obtiene a partir de la ecuación (1.9).

Tabla 4.1 Parámetros de transporte y cinéticos. (Chávez-Rivera, 1994)

$k_{G-L} a = 0.0223 \text{ s}^{-1}$	$\mu = 1.6 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
$k_{L-S} a = 0.0112 \text{ s}^{-1}$	$Y_{X/S} = 0.052 \text{ kg kg}^{-1}$
$H = 30$	$Y_{X/O_2} = 0.197 \text{ kg kg}^{-1}$
$\epsilon_g = 0.03$	$K_S = 0.00173 \text{ kg m}^{-3}$
$\epsilon_l = 0.6$	$K_{O_2} = 2.6 \times 10^{-4} \text{ kg m}^{-3}$
$\epsilon_s = 0.37$	$m_S = 1.611 \times 10^{-5} \text{ kg m}^{-3}$

Como puede observarse, los parámetros cinéticos, de transporte y dimensiones físicas que se utilizan para el modelo matemático pretenden ser los mismos utilizados o calculados en el trabajo experimental. Se realizaron simulaciones para tiempos de residencia de líquido de 1, 2 y 5 horas, que fueron utilizados en la parte experimental, con una concentración de alimentación de sustrato (34DCA) constante de  $100 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ . El tiempo de cada simulación numérica fue de entre 4 y 25 horas para 6 y 12 puntos interiores de colocación en una estación de trabajo IBM Risc 6000/320.

## 4.2 SIMULACIONES PARA TIEMPOS DE RESIDENCIA DE 1, 2 Y 5 HORAS

Se realizaron simulaciones para  $t_{\text{resid}}$  (tiempos de residencia del líquido) utilizando los parámetros antes mencionados. La concentración de oxígeno utilizada a la entrada del reactor fue la correspondiente a la concentración en el aire cuyo valor es de  $0.27 \text{ kg m}^{-3}$ . La concentración de sustrato a la entrada para estas corridas fue de  $100 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ .

El estado estacionario o estable se define cuando a un tiempo infinito no se observan cambios en las concentraciones de los componentes a la salida del reactor. Ciertamente, puede existir más de un estado estable dependiendo de la estructura del sistema de ecuaciones a resolver. Los resultados obtenidos en este trabajo, como se verá más adelante, predicen la existencia de dos estados estacionarios. Uno de ellos aparece cuando la biomasa no es activa o solo una pequeña concentración de microorganismos degrada una fracción de sustrato. Esto se observa cuando la concentración de entrada es igual a la concentración de salida; en términos de bioingeniería, existe una situación equivalente a un lavado en el reactor en la que los microorganismos están totalmente inhibidos. El segundo estado estable se observa cuando la concentración de sustrato a la salida del reactor es menor al 1 % de la concentración de entrada, no observándose cambios en esta concentración para tiempos mayores a 20 horas. Estos dos estados estacionarios fueron observados por Chávez-Rivera (1994) en su trabajo experimental.

### 4.2.1 Perfiles de Concentración Axiales Utilizando 6 Puntos Interiores de Colocación.

Una de las ventajas al utilizar el método de colocación ortogonal es que se puede obtener valores de las concentraciones en cada punto de colocación, construyéndose con esto perfiles en la dirección axial del reactor. En la Fig. 4.1 se muestran los perfiles de concentración de oxígeno en la fase gas ( $\text{CO}_{2g} / \text{CO}_{2o}$ ) con respecto a la longitud normalizada del sistema. Estos resultados fueron obtenidos utilizando un tiempo de residencia de líquido de una hora.

Cada curva de concentración axial corresponde a un tiempo determinado a partir del arranque. Como se observa en la entrada del reactor la concentración corresponde a la del oxígeno

alimentado la cual disminuye a lo largo del reactor. En el arranque, se observa una mayor tasa de transferencia debido a que en este momento existe la mínima cantidad de oxígeno presente en la fase líquida, la cual, permite la respiración de los microorganismos antes de introducir la corriente de gas. La concentración aumenta ligeramente para alcanzar el estado estacionario.

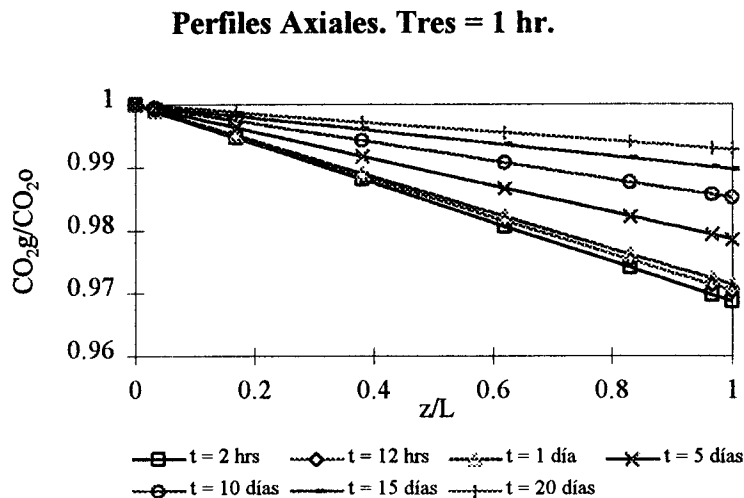


Fig. 4.1 Perfiles de concentración de oxígeno en la fase gas a diferentes tiempos.

Los perfiles de oxígeno en las fases líquida ( $CO_{2l}/CO_{2o}$ ) y en la biopelícula ( $CO_{2s}/CO_{2o}$ ) se muestran en la Fig. 4.2 y 4.3 respectivamente. La concentración inicial en la fase líquida (Fig. 4.2) corresponde a la establecida por la solubilidad de oxígeno en agua (Ley de Henry). El comportamiento en esta fase es similar a la fase gas, es decir, se observa una disminución en la concentración para un tiempo de 48 horas y un aumento para tiempos posteriores. Los perfiles demuestran que la mayor transferencia se localiza entre los primeros dos puntos de colocación que corresponde al 10 % de la longitud del reactor. La concentración inicial de oxígeno en la biopelícula, es arbitraria, ya que no se conocen datos experimentales que sugieran la magnitud de esta cantidad. Para las simulaciones se consideró, que la concentración en la biopelícula debía ser menor a la del líquido ya que existe una resistencia interfacial. Esto es observable si vemos detalladamente las magnitudes en ambas gráficas. La forma de los perfiles para la fase líquida y sólida demuestran el tipo de patrón de flujo que se consideró para construir el modelo. Los perfiles

corresponden a un patrón de flujo mezclado, es decir, se observa una concentración homogénea en la dirección axial del reactor.

**Perfiles Axiales. Tres = 1 hr.**

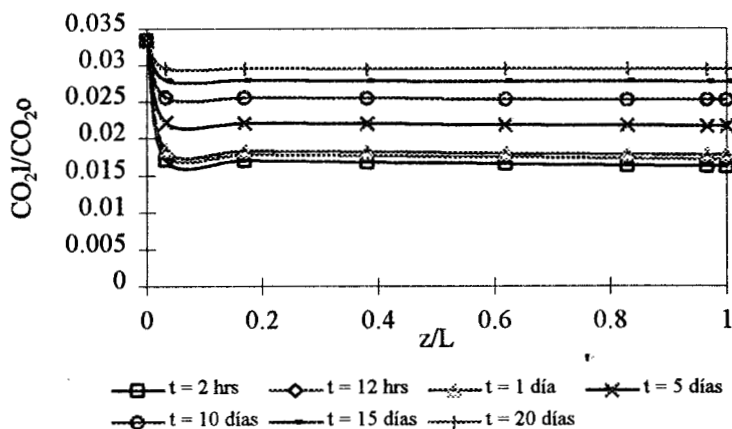


Fig. 4.2. Perfiles de concentración de oxígeno en la fase líquida.

**Perfiles Axiales. Tres = 1 hr.**

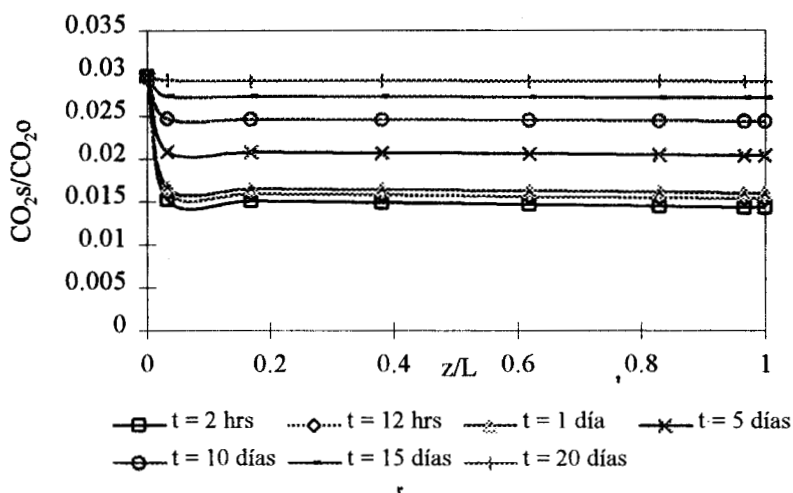


Fig. 4.3. Perfiles de concentración de oxígeno en la biopelícula.

La Fig. 4.4 muestra los perfiles de concentración de sustrato en el líquido. En esta figura, no se observan cambios en la concentración del sustrato con el tiempo, es decir, se alcanza el estado

estacionario en un periodo de tiempo de entre 3 y 5 horas. Chávez-Rivera (1994) predice estados estacionarios de la concentración de sustrato en fase líquida menores al 0.12 % de la concentración de entrada para diferentes tiempos de residencia. El modelo que se estudia en este trabajo, reproduce los estados estacionarios que aparecen en los resultados experimentales hechos por Chávez-Rivera (1994).

#### Perfiles Axiales. Tres = 1 hr.

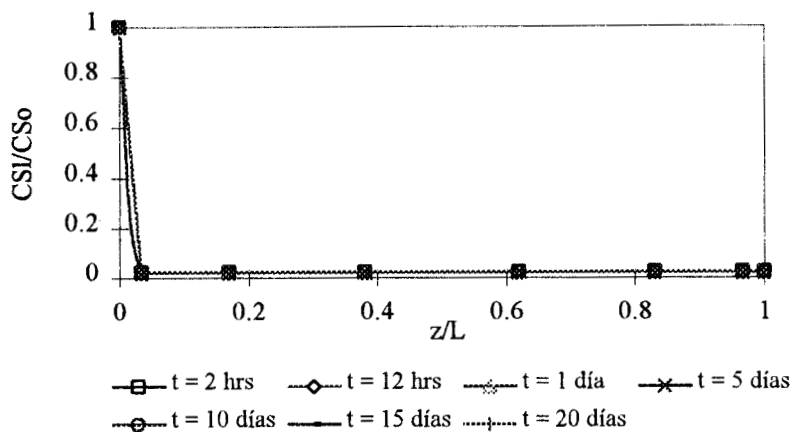


Fig. 4.4. Concentración de sustrato en la fase líquida.

Como se observa en la gráfica anterior los perfiles de concentración son homogéneos, es decir, no existen variaciones en la dirección axial del reactor debido a la consideración de suponer el patrón de flujo que rige en un RCTA. Un comportamiento similar a la fase líquida se localiza en la biopelícula, Fig. 4.5. Los resultados anteriores sugieren que la biomasa es sumamente activa ya que el consumo de sustrato se da en las primeras 5 horas como se verá mas adelante.

La consideración de un catalizador externamente depositado y los parámetros cinéticos utilizados sugieren el comportamiento descrito anteriormente, ya que observa una velocidad de consumo de sustrato grande. Melick et al. (1987) obtiene perfiles axiales en la concentración de sustrato observándose una mayor resistencia en el consumo debido al termino difusivo utilizado por él.



## Perfiles Axiales. Tres = 1 hr.

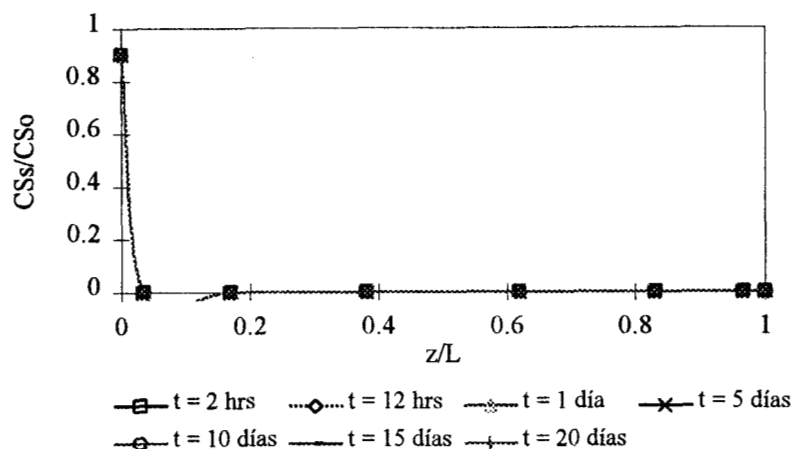


Fig. 4.5 Perfiles de sustrato en la biopelícula

La Fig. 4.5 muestra que menos del 10 % del reactor es útil después de 2 horas a partir del arranque. Como se menciono anteriormente esto se debe a la rápida tasa de consumo de sustrato.

Una de las consideraciones que se hicieron en la construcción del modelo fue que la película biológica se considera como un catalizador externamente depositado, eliminando con esto la resistencia difusiva dentro del espesor activo. Físicamente, el crecimiento del microorganismo se refleja en un aumento en la densidad de la biopelícula y un aumento en el espesor. En nuestro caso, el crecimiento se refleja en el incremento de sitios activos en la superficie de la película biológica, haciendo la similitud con reacciones catalíticas en sitios activos. El aumento en la concentración de “sitios activos” se observa en la Fig. 4.6 que representa los perfiles de concentración de microorganismos a lo largo del reactor. El crecimiento se observa ligeramente mayor en la región de mayor consumo de sustrato que abarca el 10 % de la longitud. El crecimiento de biomasa es homogéneo a lo largo del reactor debido a que se tiene un exceso de oxígeno y una misma concentración de sustrato en todo el reactor. Físicamente se ha observado un mayor crecimiento de la biomasa en la primera sección del reactor y menor crecimiento en la sección próxima a la salida (Chávez-Rivera, 1994). Esto se debe a que las células que se localizan cerca de la entrada del reactor consumen la mayor cantidad de sustrato. En nuestro caso, las consideraciones realizadas en cuanto a

un patrón de flujo tipo RCTA y catalizador externamente depositado proveen un crecimiento homogéneo a lo largo del reactor lo cual hace eficiente al sistema.

**Perfiles Axiales. Tres = 1 hr.**

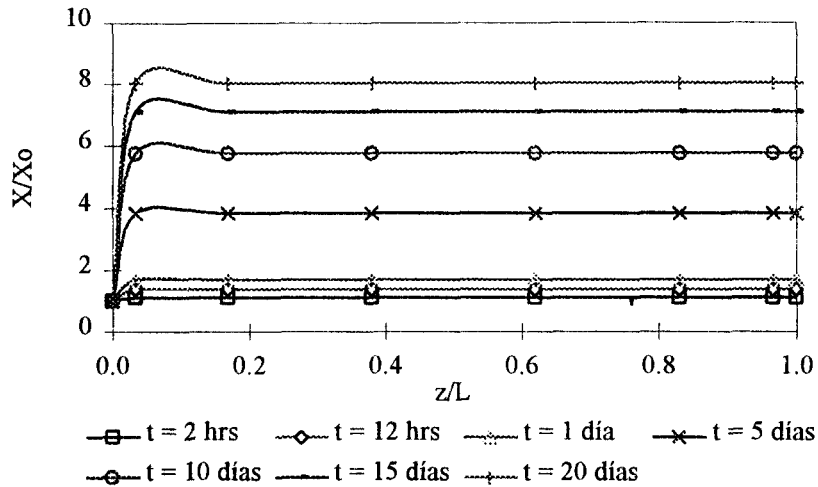


Fig. 4.6. Concentración de biomasa en dirección axial.

Uno de los parámetros de operación importantes es el tiempo de residencia del líquido, este fue variado cambiando el flujo volumétrico para diferentes simulaciones. El comportamiento del sistema con tiempos de residencia de 2 y 5 horas es cercano al discutido anteriormente; los perfiles de oxígeno y sustrato tienen el mismo comportamiento a lo largo de la dirección axial.

Las Figs. 4.7 y 4.8 muestran los perfiles de oxígeno en la fase gas para tiempos de residencia de 2 y 5 horas respectivamente. Comparando las Figs. 4.1, 4.7 y 4.8 que corresponden a corridas numéricas con diferente tiempo de residencia, se observa que la cantidad transferida de oxígeno hacia la fase líquida es mayor para un tiempo de residencia menor; este comportamiento sugiere que a mayores  $t_{resid}$  (Tiempo de residencia) la concentración de sustrato en el biorreactor es menor y por lo tanto la biomasa requiere de menor cantidad de oxígeno para llevar a cabo su función.

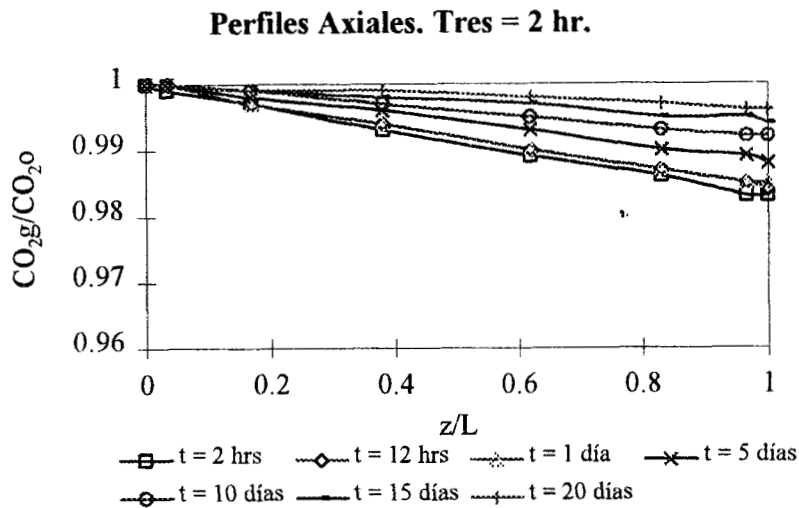


Fig. 4.7. Concentración de oxígeno  $t_{resid} = 2$  horas.

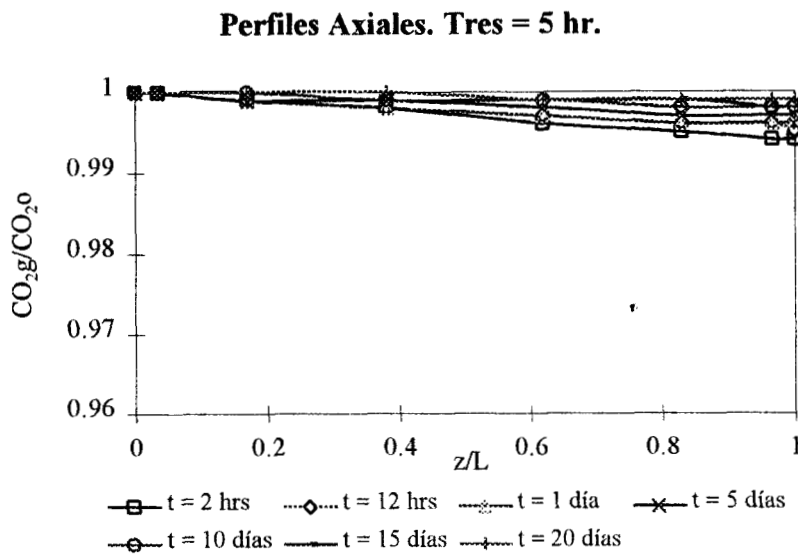


Fig. 4.8. Concentración de oxígeno  $t_{resid} = 5$  horas.

El utilizar diferentes  $t_{resid}$  de líquido tendría como consecuencia cambios en las concentraciones de las especies involucradas en el reactor. Para hacer un análisis del comportamiento del reactor cuando se utilizan diferentes  $t_{resid}$  es práctico graficar la concentración de la especie-a con respecto del  $t_{resid}$ , el cual se encuentra en horas. La Fig. 4.9 muestra la concentración de oxígeno en la fase gas a la salida del reactor, cuando se alcanza el estado

estacionario ( $t=20$  días), con respecto del  $t_{resid}$ . Como se observa la concentración de oxígeno en la fase gas a la salida del reactor es proporcional al  $t_{resid}$  esto sugiere que la tasa de consumo de oxígeno es menor con respecto al  $t_{resid}$ .

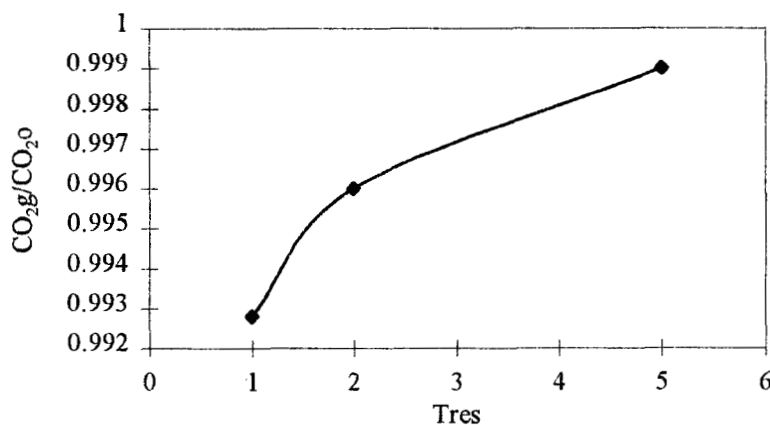


Fig. 4.9. Concentración de oxígeno en la fase gas a la salida para  $t=20$  días con respecto al tiempo de residencia.

La concentración de oxígeno en la fase líquida tiene un comportamiento similar al de la fase gas, esto se observa en la Fig. 4.10. Esta figura muestra que para tiempos de residencia mayores se tienen un consumo de oxígeno menor.

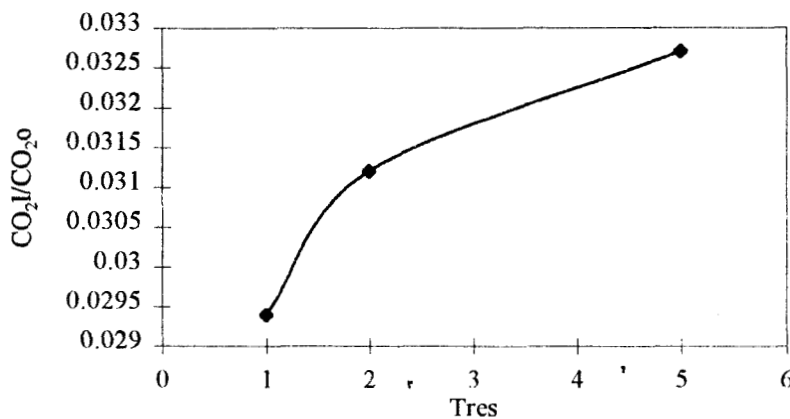


Fig. 4.10. Concentración de oxígeno en la fase líquida a la salida para  $t=20$  días con respecto al tiempo de residencia.

El comportamiento descrito por las Fig. 4.9 y 4.10 se explica si observamos la Fig. 4.11. En la Fig. 4.11 se grafica la concentración de sustrato en el líquido a la salida del reactor para  $t = 20$  días contra el tiempo de  $t_{resid}$ . Como se observa, la concentración de sustrato es menor para un  $t_{resid}$  de 5 horas, esto implica que la cantidad de oxígeno que requieren los microorganismos para consumir al sustrato es menor con respecto a un  $t_{resid}$  de una hora. Al aumentar el  $t_{resid}$  implícitamente se disminuye el flujo de líquido y la concentración de sustrato es menor ya que se tienen una tasa de dilución mayor, por lo tanto los microorganismos requieren menor cantidad de oxígeno para llevar a cabo su función.

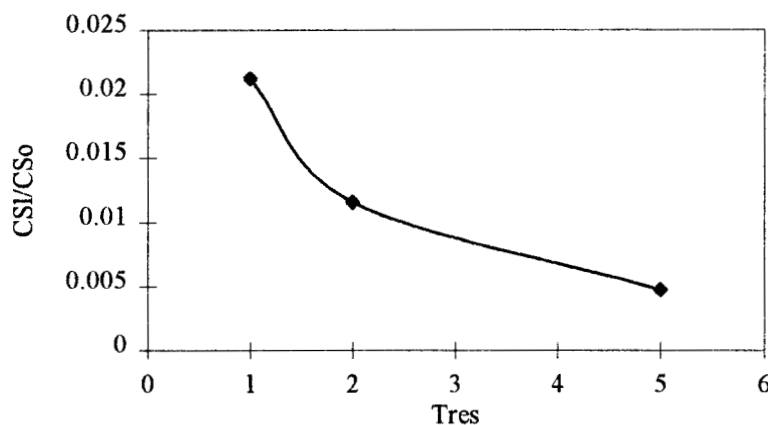


Fig. 4.11. Concentración de sustrato en el líquido a la salida para  $t=20$  días con respecto al tiempo de residencia.

El crecimiento de los microorganismos depende de la concentración de sustrato en el medio, por lo tanto, si se tiene poca cantidad de sustrato la concentración de biomasa es proporcional a la concentración de sustrato. La Fig. 4.12 demuestra la afirmación anterior. En esta figura se grafica la concentración de biomasa para  $t=20$  días con respecto al  $t_{resid}$ . Un tiempo de residencia menor (1 hora) implica mayor cantidad de sustrato y por lo tanto un crecimiento mayor con respecto a un  $t_{resid}$  de 5 horas.

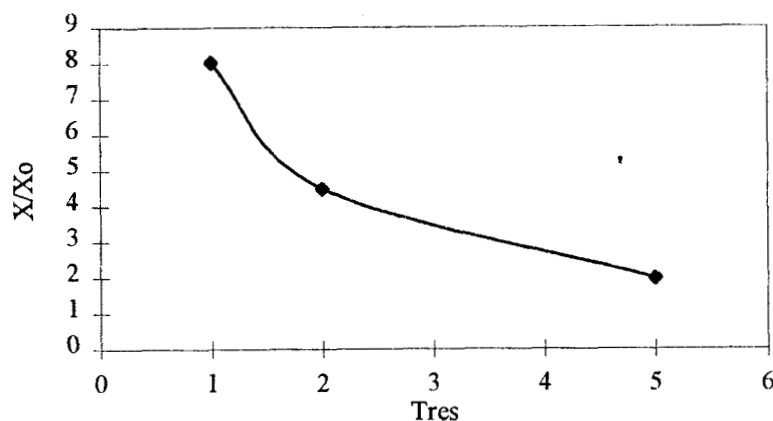


Fig. 4.12. Concentración de biomasa a la salida para  $t=20$  días con respecto al tiempo de residencia.

#### 4.2.2 Perfiles de Concentración Axiales Utilizando 12 Puntos Interiores de Colocación.

El error numérico obtenido en los perfiles axiales depende del número de puntos de colocación utilizados en las simulaciones y sobre todo de la forma de estos perfiles (Finlayson, 1980). Se realizaron simulaciones con 12 puntos interiores de colocación utilizando los mismos parámetros y condiciones de operación de las corridas obtenidas para 6 puntos. Las Fig. 4.13, 4.14 y 4.15 muestran las concentraciones de oxígeno en la fase gas para los tiempos de residencia de 1, 2 y 5 horas respectivamente.

Comparando las figuras 4.1 y 4.13, que corresponden a la concentración de oxígeno en el gas para un mismo tiempo de residencia utilizando 6 y 12 puntos interiores de colocación, no se observan diferencias significativas entre los dos conjuntos de perfiles. Lo mismo se sucede para los perfiles con 2 y 5 horas de  $T_{resid}$ . Como se observa en este conjunto de figuras, los perfiles no presentan cambios significativos debido a los parámetros utilizados y a la estructura del sistema de ecuaciones

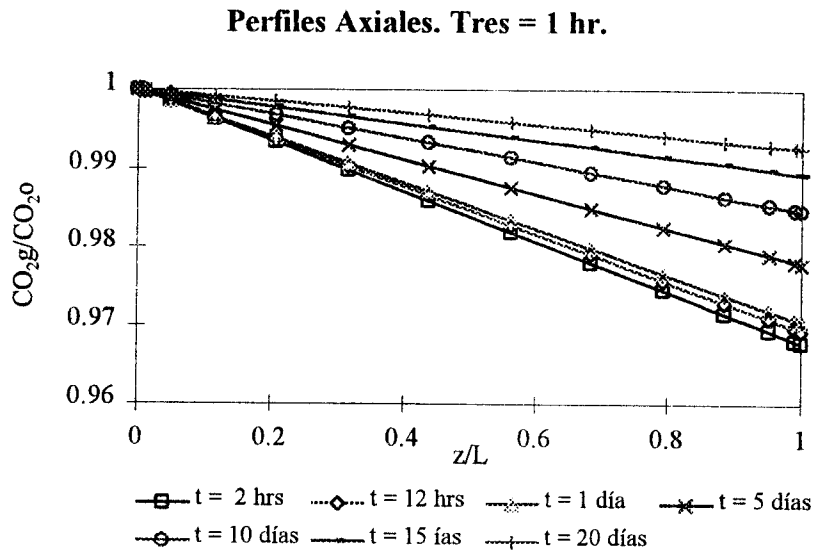


Fig. 4.13. Perfiles de concentración de oxígeno utilizando 12 puntos interiores.  $T_{\text{resid}} = 1$  horas.

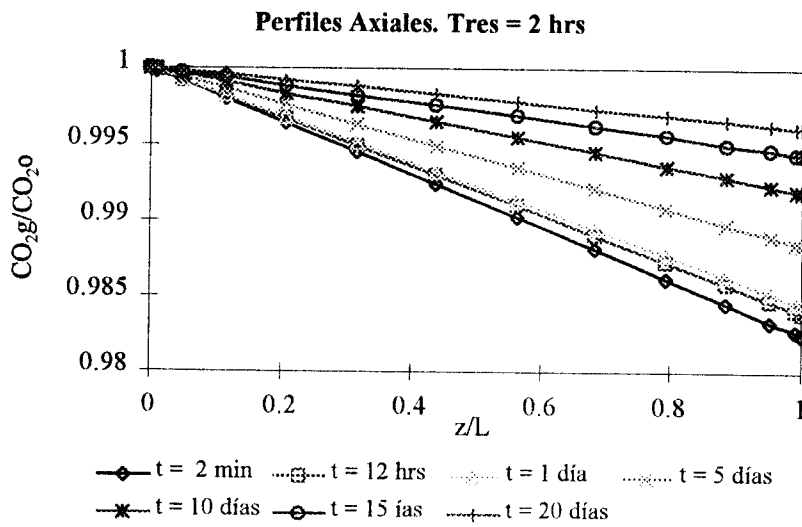


Fig. 4.14. Perfiles de concentración de oxígeno utilizando 12 puntos interiores.  $T_{\text{resid}} = 2$  horas.

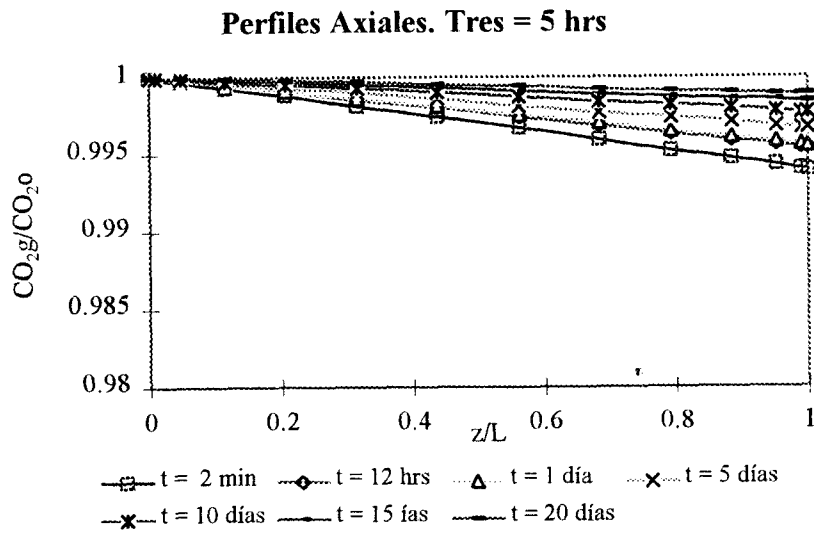


Fig. 4.15. Perfiles de concentración de oxígeno utilizando 12 puntos interiores.  $t_{resid} = 5$  horas.



### 4.3 PERFILES DE CONCENTRACIÓN A LA SALIDA DE REACTOR

El estado estacionario es difícil de visualizar en los perfiles axiales mostrados anteriormente. Gráficas de concentración contra tiempo muestran los estados estacionarios de las especies involucradas. Las figuras siguientes muestran estos perfiles con respecto del tiempo utilizando los resultados obtenidos en la sección 4.2. Los valores de concentración son tomados en el último punto de colocación que representa la salida del reactor.

La Fig. 4.21 muestra los perfiles de concentración de oxígeno en la fase gas a la salida del reactor con respecto del tiempo utilizando tiempos de residencia de 1, 2 y 5 horas. Cada 1000 tiempos adimensionales, ( $t/t_{ref}$ ), corresponde aproximadamente a un día de tiempo de operación, el tiempo de referencia tienen un valor de 86.9 s. Como puede observarse en esta figura es más notorio el comportamiento descrito en la sección 4.2. Para tiempos de residencia mayores se tiene mayor cantidad de oxígeno en la fase gas, esto quiere decir que existe poca cantidad de oxígeno transferido hacia la fase líquida. Al disminuir el tiempo de residencia disminuye el tiempo de contacto de oxígeno y sustrato en la fase líquida con la biopelícula, esto puede tener como consecuencia que existan mayores concentraciones en el líquido de estas especies, debido a que se tienen tasas menores de consumo. Al utilizar un tiempo de residencia de 1 hora las cantidades de sustrato y oxígeno son menores con respecto a un tiempo de residencia mayor, es decir, la dilución de oxígeno y sustrato para tiempos de residencia menores, son mayores. En la Fig. 4.21 las concentraciones de oxígeno para los diferentes tiempos de residencia aumentan con respecto del tiempo de residencia ya que se requiere de menor cantidad transferida a la fase líquida y posteriormente menor consumo de oxígeno para completar el metabolismo celular. La concentración de oxígeno en la fase líquida presenta un comportamiento similar al del gas, las magnitudes están regidas por la Ley de Henry, la Fig. 4.22 muestra estos valores.

La Fig. 4.23 muestra los estados estacionarios para la concentración de sustrato utilizando los diferentes tiempos de residencia. En esta gráfica se observa una concentración de sustrato ligeramente mayor para un tiempo de residencia de 1 hora. Esto debido a que, como se discutió anteriormente, se tiene una dilución menor de sustrato para tiempos de residencia menores. En Fig. 4.23 se observa que se alcanza el estado estacionario para las tres corridas numéricas en

aproximadamente 5 horas de tiempo de operación a partir del arranque del reactor. Lo anterior es mas notorio al hacer una reducción de escala en el eje de las abscisas

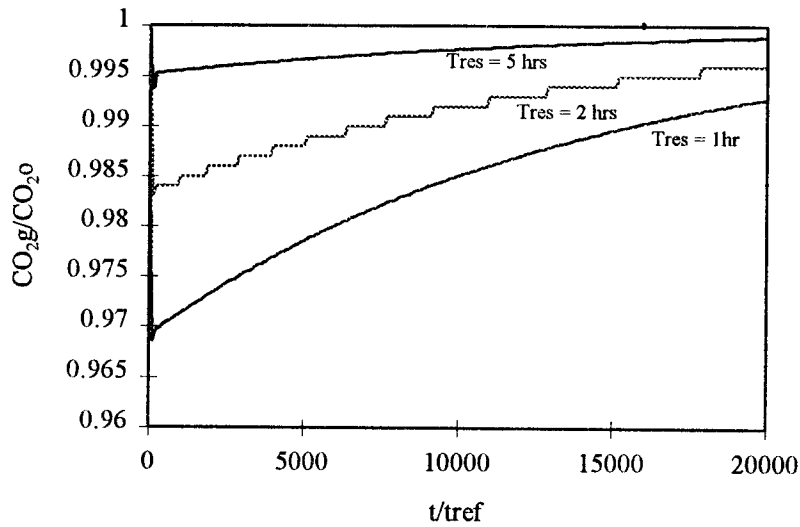


Fig. 4.21 Concentración de oxígeno en la fase gas a la salida del reactor para tiempos de residencia de 1, 2 y 5 horas.

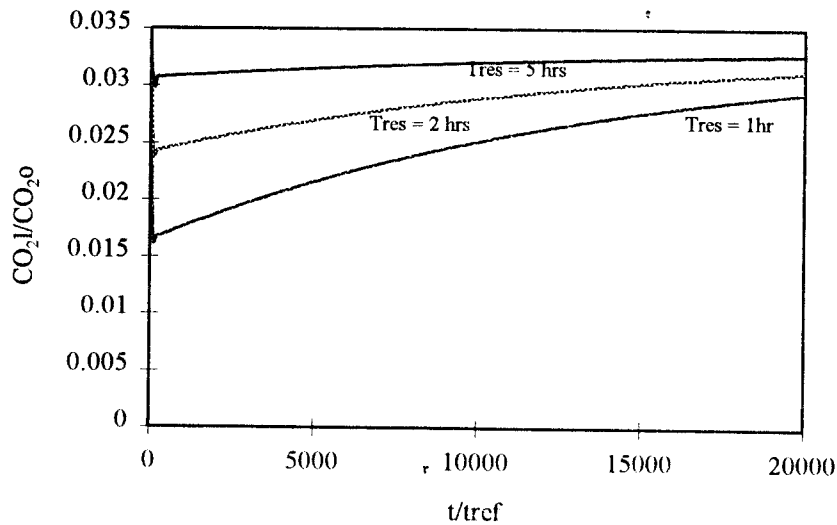


Fig. 4.22 Concentración de oxígeno en la fase líquida a la salida del reactor.

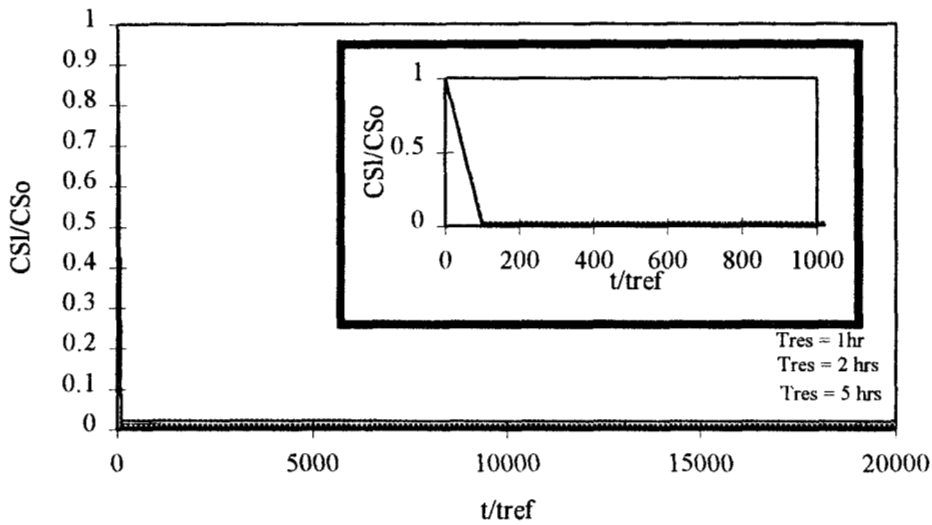


Fig. 4.23 Concentración de sustrato a la salida del reactor para diferentes tiempos de residencia. Reducción de escala.

La Fig. 4.24 muestra las concentraciones de biomasa en cualquier punto del reactor, ya que recordemos que esta es homogénea a lo largo del eje axial para cualquier tiempo, utilizando diferentes tiempos de residencia. Como se observa, para un tiempo de residencia menor el crecimiento de microorganismos es mayor. Este crecimiento mayor se debe a que existe mayor cantidad de sustrato (se encuentra menos diluido) cuando el tiempo de residencia disminuye. De cualquier forma, recordemos que la cinética de crecimiento contiene términos de limitación por sustrato y oxígeno, por lo tanto, si se tiene poca cantidad de sustrato el crecimiento se ve limitado. Al tener un crecimiento que esta limitado por el sustrato, la biomasa requiere de menor cantidad de oxígeno para realizar su función; esto sucede cuando se trabaja con tiempos de residencia mayores.

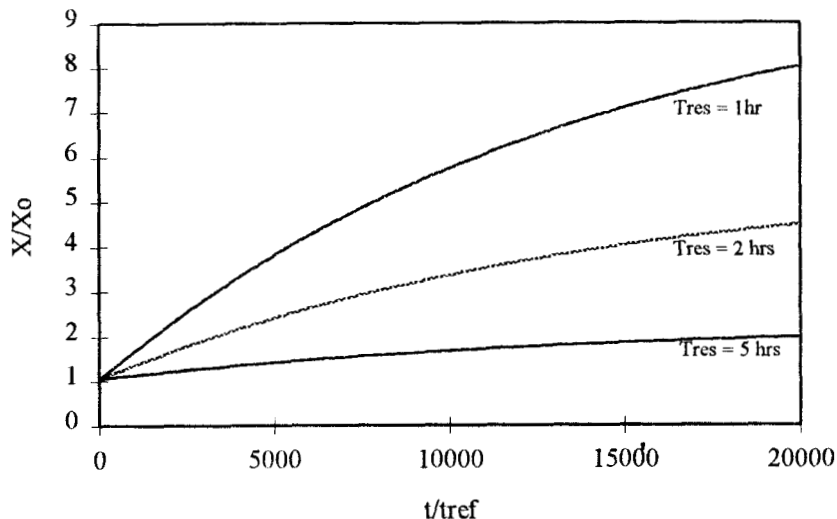


Fig. 4.24 Concentración de biomasa para diferentes tiempos de residencia.

Para un tiempo de residencia de una hora el crecimiento en 20 días es cerca del 700 % de la concentración inicial, de 2 horas de 300 % y 5 horas de 100 %. La cantidad de biomasa obtenida en 20 días podría pensarse que es excesiva, sin embargo, resultados experimentales obtenidos por Freitas dos Santos y Livingston (1995) muestran un aumento en el espesor de la biopelícula que se traduce en altas concentraciones de biomasa, en el caso de reactores de membrana. Estos resultados experimentales se pueden observar en la Fig. 4.25. En esta figura se muestra el espesor de la biopelícula en función del tiempo para un reactor que utiliza una membrana como soporte de los microorganismos. La Fig. 4.25 a) muestra los resultados experimentales para 22 días de operación utilizando un flujo a contracorriente de líquido y aire. La Fig. 4.25 b) utiliza flujos paralelos de la fase líquida y gas. Las condiciones H1, H2, H3 y H4 corresponden a alturas de la membrana utilizadas para las corridas experimentales. En la Fig. 4.25 c) se presenta en promedio del incremento del espesor para las corridas experimentales efectuadas.

Freitas dos Santos y Livingston (1995) reportan una densidad promedio de la biopelícula de  $60 \text{ kg m}^{-3}$  indicando que el rango en la densidad de biopelícula es de  $10 - 130 \text{ kg m}^{-3}$ .

Los resultados experimentales mostrados en esta Fig. 4.25 pueden enmarcar las concentraciones de biomasa obtenidas en las simulaciones realizadas en este trabajo en un contexto

real. Además, tienen que tomarse en cuenta que el modelo que describe el crecimiento de microorganismos carece de términos como muerte y arrastre o desprendimiento debido a los esfuerzos cortantes, que disminuirían la concentración de microorganismos.

El crecimiento de la biomasa encontrado en los resultados numéricos obtenidos en este trabajo, se vería reflejado como un incremento en los sitios activos del biocatalizador debido a que se considera una área de reacción microbiana y no un volumen.

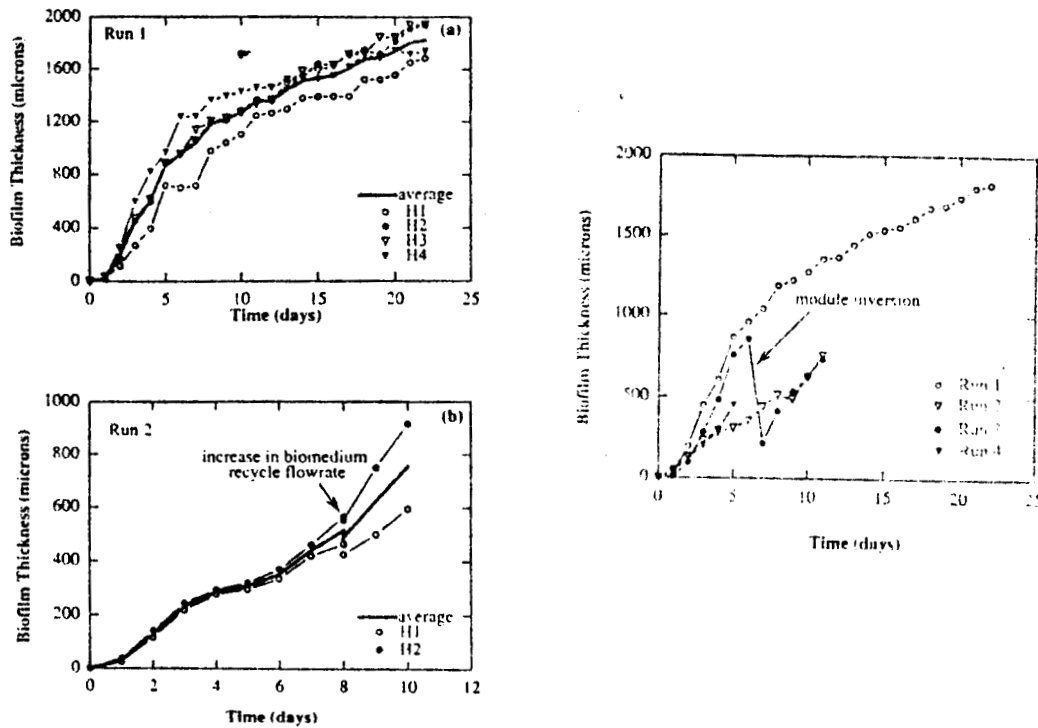


Fig. 4.25. Resultados experimentales. Evolución del espesor de biopelícula sobre el tiempo en un biorreactor de membrana usando *Xanthobacter autotrophicus* GJ10. a) Corridas 1 y 2 utilizando flujo contracorriente, b) corridas 3 y 4 utilizando flujo paralelo, c) promedio en las cuatro corridas experimentales. H1, H2, H3 y H4 corresponden longitudes de la membrana utilizada. (Freitas dos Santos y Livingston, 1995).

## **CAPITULO 5**

# **COMPORTAMIENTO OPERACIONAL DEL REACTOR**

En este capítulo se hace un estudio del comportamiento operacional del reactor cuando se realizan cambios en los parámetros de transporte, como es el coeficiente de transferencia gas-líquido. También, se hace un análisis de la dinámica del sistema cuando se utilizan valores mayores en la concentración de entrada de sustrato y se ejercen tensiones externas como cambios repentinos en estas concentraciones. Mediante los resultados anteriores se pretende realizar un estudio de la sensibilidad paramétrica del reactor biológico.

Finalmente, se realizan simulaciones numéricas utilizando diferentes términos en las cinéticas de crecimiento con la finalidad de hacer una comparación de los resultados numéricos y poder elegir la cinética que describa con mayor exactitud los resultados experimentales obtenidos por Chávez.Rivera (1994).

---

## 5.1 CONCENTRACIONES DE SUSTRATO MAYORES EN LA ENTRADA DEL REACTOR

En procesos continuos es común tener variaciones en las concentraciones de sustrato a la entrada del reactor debido a alteraciones operacionales en el sistema. En ocasiones puede aumentar la cantidad de sustrato o contaminante que se requiere eliminar teniendo como consecuencia un incremento en la concentración de contaminante a la entrada del reactor.

En esta sección se hace un estudio del comportamiento del reactor cuando es necesario introducir cantidades mayores de sustrato, que es el mismo que se utilizó en el capítulo anterior, es decir, el sustrato utilizado es 3-4 Dicloroanilina. La concentración de sustrato se incrementa desde el arranque del reactor y se mantiene constante hasta que se alcanza el estado estacionario. Los valores para las concentraciones de sustrato fueron de  $100 \times 10^{-3}$ ,  $250 \times 10^{-3}$  y  $500 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ . Los valores de los parámetros cinéticos y de transporte fueron los utilizados en el Capítulo 4.

En la Fig. 5.1 se muestran los perfiles de concentración de oxígeno en el gas con respecto del tiempo, utilizando un tiempo de residencia de 2 horas. Las concentraciones de sustrato a la entrada fueron de  $100 \times 10^{-3}$  y  $250 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ .

Como se observa en la Fig. 5.1, existe mayor consumo de oxígeno cuando se incrementa la concentración de sustrato a la entrada del reactor, esto se debe a que los microorganismos requieren de mayor cantidad de oxígeno para poder remover cantidades mayores de sustrato. Para concentraciones mayores de sustrato se observa mayor consumo de oxígeno en cada una de las fases.

En la Fig.5.2 se observan los perfiles de concentración de oxígeno en la fase líquida para diferentes tiempos de residencia. Los perfiles que se presentan en esta figura tienen un comportamiento similar a los resultados obtenidos en el capítulo anterior, es decir, un incremento en la concentración de sustrato tiene como consecuencia un aumento en la concentración de biomasa que a su vez necesita de mayores cantidades de oxígeno para llevar a cabo el metabolismo aeróbico.

---

Variación en CSo. Tres = 2 hrs

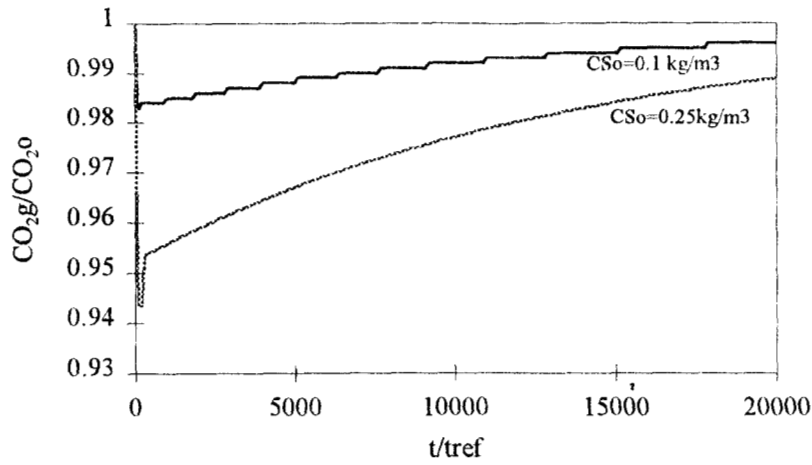


Fig. 5.1 Concentración de oxígeno en el gas utilizando diferentes magnitudes en la concentración de sustrato a la entrada.

Variación en CSo. Tres = 2 hrs.

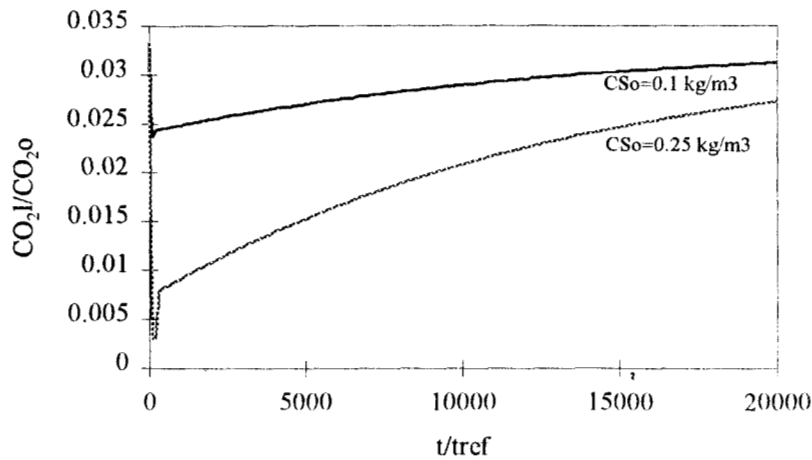


Fig. 5.2. Concentración de oxígeno en la fase líquida. Concentración mayor de sustrato a la entrada.

En el arranque del reactor se tiene la mayor tasa de consumo de oxígeno debido al requerimiento de esta especie por parte de la biomasa cuando se tienen concentraciones de sustrato altas; conforme transcurre el tiempo se observa un incremento en la concentración de oxígeno en el



reactor. Este incremento se debe a que en determinado tiempo el sustrato es consumido y los microorganismos no requieren de la misma cantidad de oxígeno para llevar a cabo la eliminación del contaminante.

La Fig. 5.3 muestra que al incrementar la concentración de sustrato el tiempo para la eliminación es mayor, es decir, se requiere de mayor tiempo de operación para lograr la remoción del sustrato, en este caso, un aumento de 150 % en esta concentración desplaza en 3 horas la eliminación de sustrato con respecto a una concentración de  $100 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ .

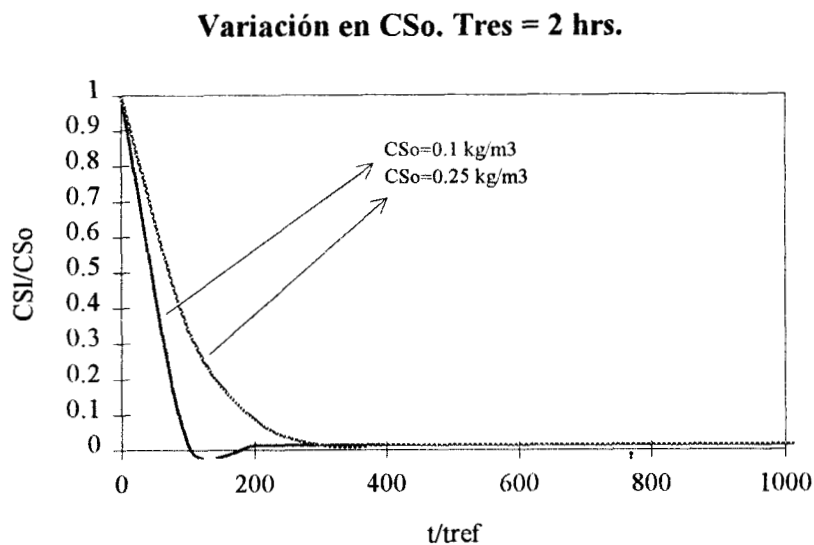


Fig. 5.3. Concentración de sustrato en la fase líquida.

En la Fig. 5.4 se muestra el crecimiento de microorganismos en función de diferentes valores de CSo.

Un aumento en la concentración de sustrato a la entrada implicaría mas tiempo para eliminar al contaminante no deseado. El crecimiento celular depende de la cantidad de sustrato presente, por lo tanto, si se tienen concentraciones de sustrato mayores el crecimiento se verá favorecido como sucede en la Fig. 5.4. La biomasa crece con mayor velocidad si se tienen cantidades de sustrato que no limitan su crecimiento, como consecuencia de esto, existe un mayor consumo de oxígeno necesario para llevar a cabo el metabolismo celular.

## Variación en CSo. Tres = 2 hrs.

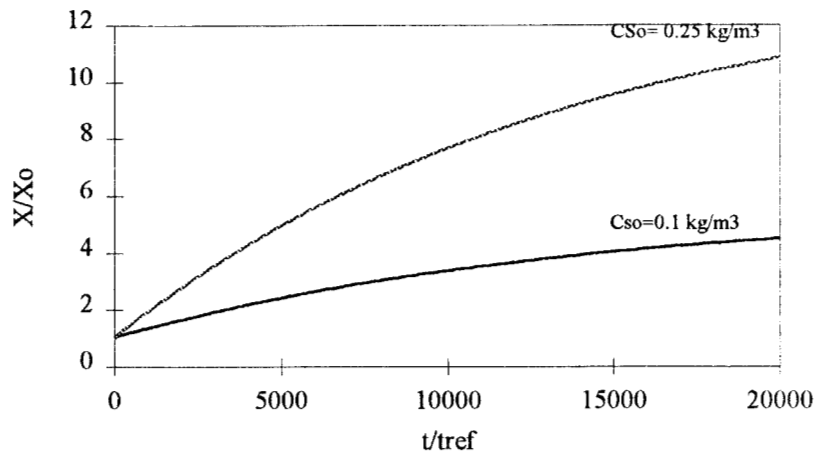


Fig. 5.4. Concentración de microorganismos en función de CSo.

En los resultados analizados hasta este momento, se ha visto que el componente que limita fuertemente el crecimiento celular es el sustrato. El sistema podría soportar concentraciones iniciales mayores debido a la fuerte actividad biocatalítica, esto posiblemente no se observe en la práctica ya que la mayoría de los sustratos en concentraciones elevadas pueden ser inhibitorios, como se mostrara mas adelante.

Las figuras siguientes son resultados obtenidos para un tiempo de residencia de 5 horas. La Fig. 5.5 muestra los perfiles en el gas con respecto al tiempo en función de la concentración a la entrada del reactor. En esta figura se observa un comportamiento similar al de la Fig. 5.1. Las concentraciones de entrada utilizados para esta corridas numéricas fueron de 100, 250 y 500  $\times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ .

La Fig. 5.6 corresponde a los perfiles de oxígeno en la fase líquida. La cantidad de oxígeno en esta fase es inversamente proporcional a la concentración inicial. La Fig. 5.7 muestra las concentraciones de sustrato en función de la concentración inicial. En este caso un aumento de 400 % en la cantidad inicial desplaza al tiempo de eliminación en 12 horas con respecto a una concentración de  $100 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ .

La Fig. 5.8 muestra la cantidad de biomasa en función de la cantidad de sustrato.

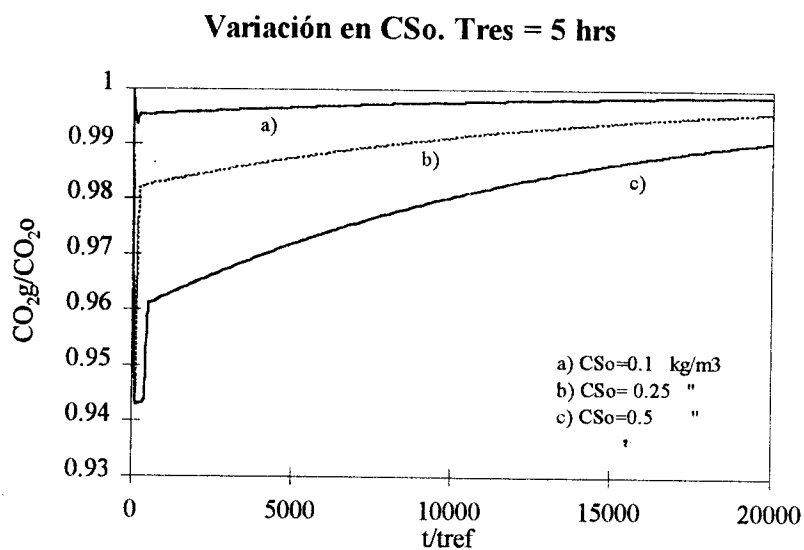


Fig. 5.5. Concentración de oxígeno en el gas.

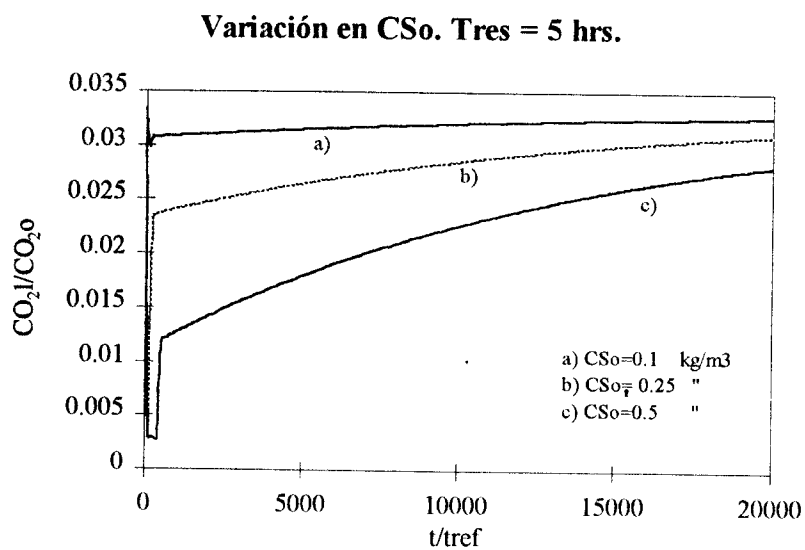


Fig. 5.6. Concentración de oxígeno en el líquido.

Variación en  $C_{S0}$ . Tres = 5 hrs

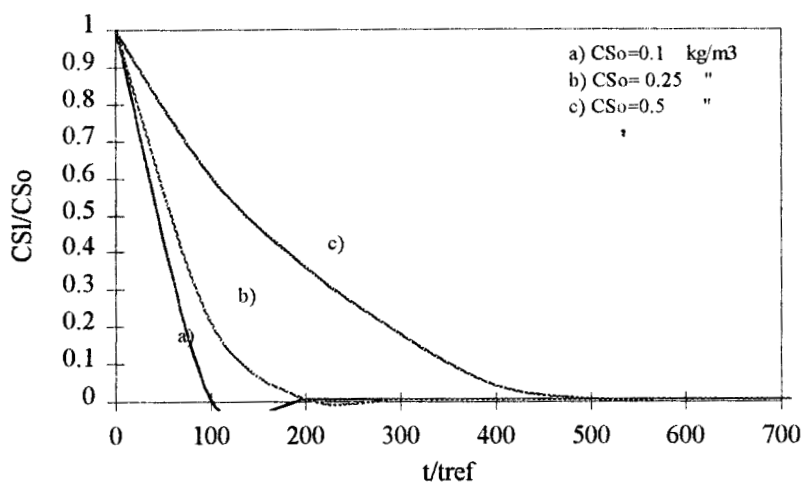


Fig. 5.7 Concentración de sustrato en el líquido.

Al aumentar la concentración de sustrato a la entrada, se incrementa el tiempo de eliminación empleado por los microorganismos y el crecimiento se ve acelerado.

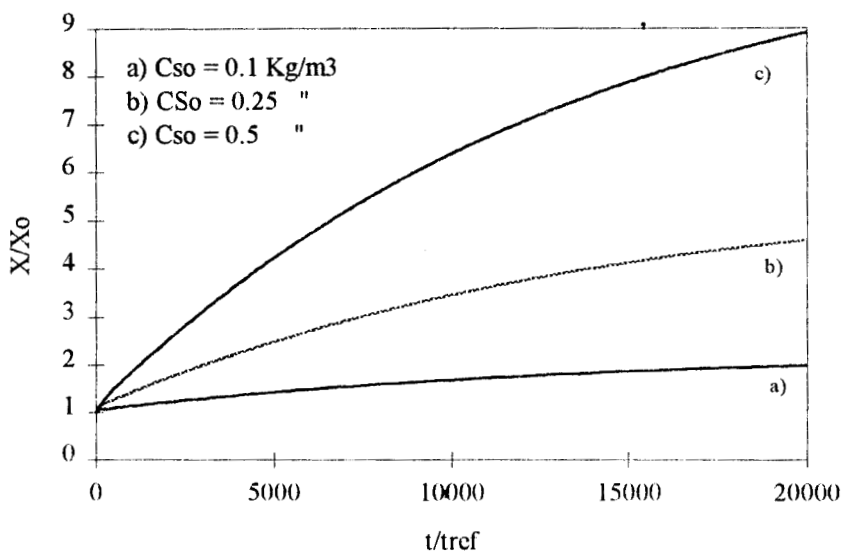


Fig. 5.8. Concentración de biomasa.

## 5.2 CAMBIOS REPENTINOS EN LA CONCENTRACIÓN DE SUSTRATO A LA ENTRADA DEL BIORREACTOR

Los reactores biológicos frecuentemente están sujetos a variaciones en las condiciones ambientales. En particular, los procesos para tratamiento de aguas residuales experimentan diariamente grandes fluctuaciones en la concentración de entrada y tiempos de residencia. Es necesario tener información del comportamiento dinámico del sistema para definir las posibles respuestas a estos cambios repentinos en las condiciones de operación (Sundtrom et al, 1976).

Los resultados mostrados a continuación se obtuvieron manteniendo constante el tiempo de residencia para cada simulación numérica. A un tiempo determinado, posterior al tiempo en que se llega al estado estacionario, se incremento la concentración de sustrato en forma de escalón desde  $100 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  a  $250 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  y  $500 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$ . Los valores de los parámetros fueron los utilizados en el capítulo anterior.

En la Fig. 5.9 se muestra la concentración de sustrato a la salida del reactor en función de cambios repentinos en forma de escalón a la entrada. El tiempo de residencia utilizado fue de 2 horas. Como se observa, el sistema soporta cambios hasta del 250 % de la concentración de entrada. Para cambios en las concentraciones de  $250 \times 10^{-3}$  y  $300 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  no se observa una alteración en el sistema, sin embargo, concentraciones mayores de  $400 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  inhiben el crecimiento de los microorganismos ya que se observa un fuerte aumento en la concentración de sustrato que tiene como resultado la muerte de los microorganismos.

El comportamiento anterior se explica a partir de un análisis del modelo. El balance en la biomasa presenta un término de inhibición de tipo Luong, es decir, se tiene una concentración máxima permisible de sustrato, un valor mayor a esta concentración tiene como resultado la muerte de los microorganismos.

El tiempo que tarda el reactor en regresar al estado estacionario para un escalón de  $350 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  es de aproximadamente de 3 días.

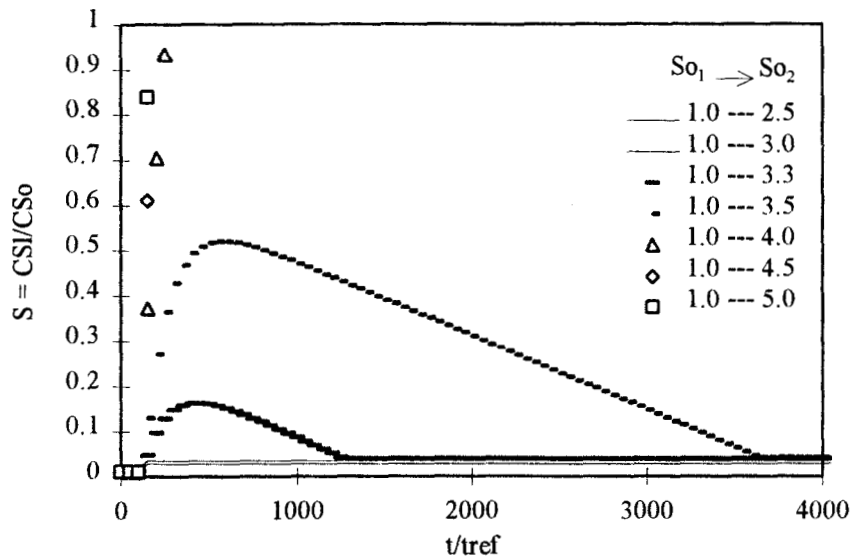


Fig. 5.9. Efecto de cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada.  $T_{res} = 2$  hrs. Cambios en la concentración en forma de escalones de  $100 \times 10^{-3}$  hasta  $500 \times 10^{-3}$ .

En la Fig. 5.10 se muestran los perfiles de concentración de sustrato cuando se utiliza un tiempo de residencia de 5 horas. Para este  $T_{res}$  no se observan disparos en las concentraciones que darían como resultados la muerte de la biomasa por inhibición de sustrato. Como se observa para un tiempo de residencia de 5 horas, el sistema soporta cambios súbitos hasta de 400 % de la concentración inicial. Para escalones menores de  $430 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  no se observan perturbaciones en el reactor. En este caso, para un escalón de  $500 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$  el regreso al estado estacionario fue de menos de 4 días aproximadamente.

Los resultados obtenidos en las figuras anteriores son cualitativamente similares a los obtenidos por Chávez-Rivera (1994) en su trabajo experimental. La diferencia notable es que en los resultados experimentales el incremento en la concentración aplicando la misma magnitud en los escalones, las cantidades de sustrato observadas son menores y el tiempo en regresar al estado estacionario es un poco menor. La Fig. 5.11 presenta los resultados experimentales obtenidos por Chávez-Rivera (1994).

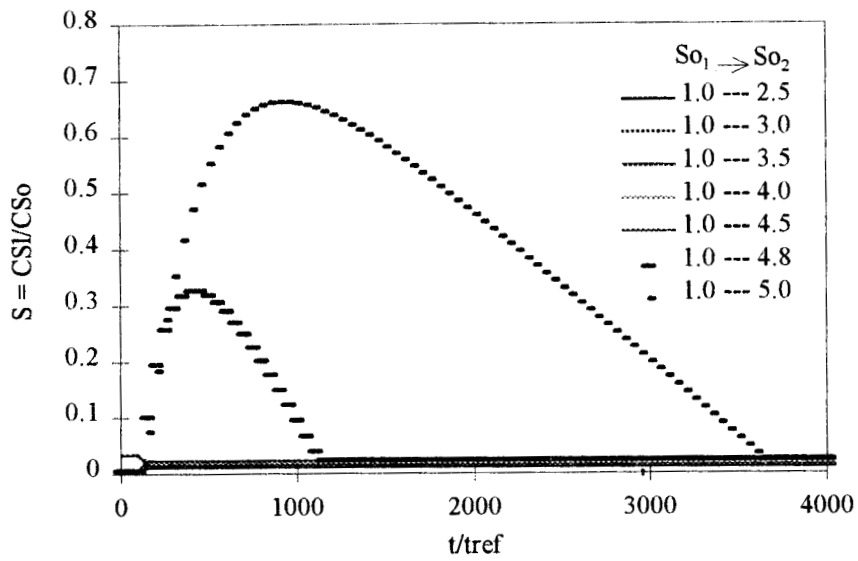


Fig. 5.10. Efecto de cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada.  $T_{res} = 5$  horas. Cambios en la concentración en forma de escalones de  $100 \times 10^{-3}$  hasta  $500 \times 10^{-3}$ .

Se realizaron corridas numéricas realizando cambios repentinos en el tiempo de residencia para un valor constante en la concentración de entrada. En este caso no se observaron cambios en concentración a la salida del reactor biológico.

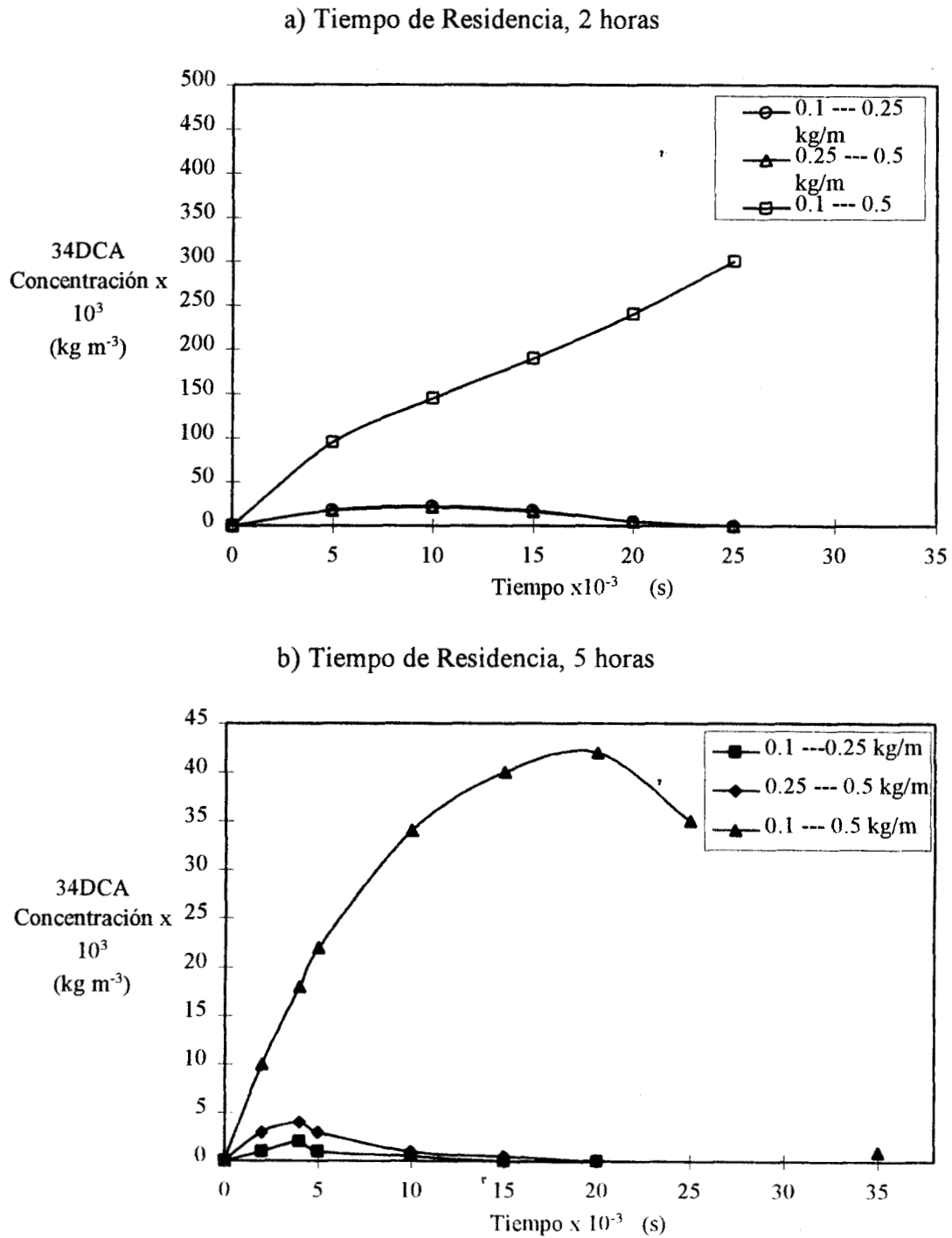


Fig. 5.11 Resultados experimentales. Efecto de un cambio en la concentración  
 Tiempo de residencia de 2 y 5 horas. (Chávez-Rivera, 1994).



### 5.3 EFECTO EN EL CRECIMIENTO CELULAR EN FUNCIÓN DE LA HIDRODINÁMICA DEL REACTOR

El conocimiento de la hidrodinámica y la reacción global en un reactor biológico es fundamental para el diseño de este tipo de sistemas. La hidrodinámica contempla una serie de factores tales como el mezclado, difusión o dispersión, convección de una de las especies y la transferencia de masa en la interfase gas-líquido. El modelo matemático utilizado en este trabajo solo contempla la transferencia de masa en las interfases gas-líquido y líquido-sólido, por lo tanto, la hidrodinámica del sistema se localiza englobada dentro de los coeficientes de transferencia de masa en las interfases. Los coeficientes de transferencia de masa dependen directamente del número de Reynolds y este a su vez de la velocidad de cada una de las fases. En esta sección se realiza un análisis del efecto que se tienen en el comportamiento del reactor cuando se aumenta el flujo de gas o indirectamente la velocidad de este. Los flujos de aire utilizados y las velocidades asociadas a este flujo se muestran en la Tabla 5.2. Los coeficientes de transferencia de masa en la interfase gas-líquido asociados a la velocidad del gas se obtuvieron a partir de la ecuación 1.9. El área transversal del reactor es de  $0.0019634 \text{ m}^2$ .

$F_{\text{aire}} \text{ (m}^3/\text{s)}$	$U_g \text{ (m/s)}$	$k_{gl}a_v \text{ (s}^{-1}\text{)}$
$14.7 \times 10^{-6}$	0.0075	0.0271
$24.7 \times 10^{-6}$	0.0125	0.0413
$34.7 \times 10^{-6}$	0.0176	0.0547
$60.7 \times 10^{-6}$	0.03	0.0848

Tabla 5.2 Flujos de aire, velocidades y coeficientes de transferencia utilizados para el análisis en la hidrodinámica.

Los parámetros cinéticos y de transporte utilizados para la obtención de los siguientes resultados fueron los utilizados en el capítulo anterior. El tiempo de residencia seleccionado fue de 2 horas. La Fig. 5.12 muestra los perfiles de concentración de oxígeno en la fase gas con respecto del tiempo, estas concentraciones están dadas a la salida del reactor.

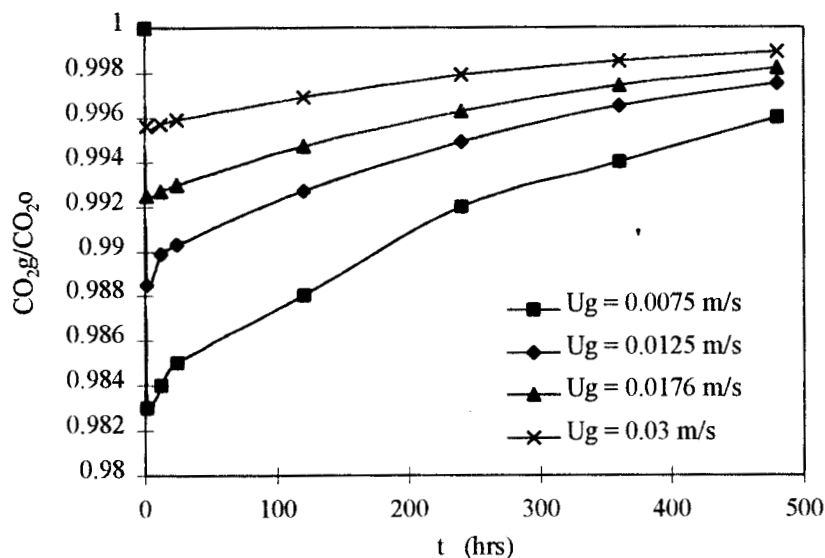


Fig. 5.12 Concentración de oxígeno en el gas a la salida del reactor en función del coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líqu.

Como se observa en la figura anterior, la concentración de oxígeno en esta fase es mayor para un coeficiente de transferencia cuyo valor absoluto es mas grande. El  $k_{gl}a_v$  depende de la velocidad de gas y esta a su vez del flujo de aire, por lo tanto si se tiene una velocidad mayor se observaran cantidades mayores de oxígeno. El coeficiente de transferencia tiende a incrementarse cuando se aumenta la velocidad del gas, por lo tanto la resistencia a la transferencia de masa en la interfase gas-líquida disminuirá. Esta afirmación se puede demostrar al observar las concentraciones de oxígeno en la fase líquida en función del coeficiente de transferencia o de la velocidad del gas en la Fig. 5.13. Como se observa, la concentración de oxígeno en esta fase es directamente proporcional al  $k_{gl}a_v$ .

El modelo utilizado en este trabajo incluye una ecuación que representa el balance de materia para la biomasa. En esta ecuación se plantea que el crecimiento depende de la cantidad de sustrato y de oxígeno que llegan a la biopelícula a través de la interfase líq-sól. Las cantidades de sustrato y oxígeno disueltas en el líquido que abandona el reactor dependen de la tasa de consumo de estas dos especies por parte de la biomasa. Una hipótesis que podría formularse al realizar el

análisis de la hidrodinámica es que si se aumenta  $k_{gl}a_v$  se podría lograr mayor transferencia de masa hacia la biopelícula y por lo tanto la tasa de consumo de sustrato y oxígeno aumentarían dando como consecuencia un efecto directo de la hidrodinámica en el crecimiento celular.

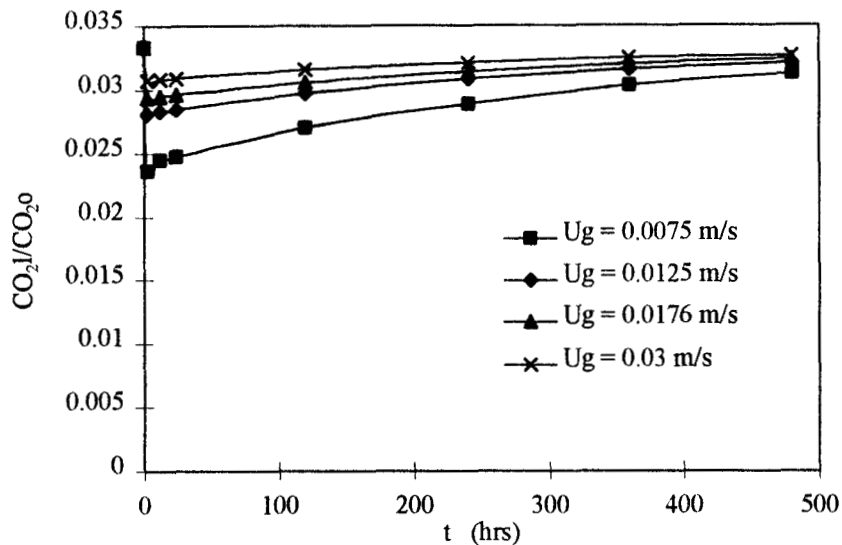


Fig. 5.13 Concentración de oxígeno en el líquido a la salida del reactor en función del coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líqu.

Sin embargo, la Fig. 5.14 y 5.15, que corresponden a la concentración de sustrato a la salida del reactor y a la cantidad de biomasa formada, respectivamente; no muestran ningún efecto de la hidrodinámica en el crecimiento celular.

El no observarse ningún efecto puede deberse a que la velocidad de reacción es muy rápida, es decir, la tasa de consumo de sustrato es muy rápida, debe recordarse que la zona de reacción en la biopelícula es considerada solamente en la superficie y por lo tanto la reacción es instantánea, es decir no existen resistencias en esta fase. Si se consideran resistencias difusionales y cinéticas en el modelo el efecto de la hidrodinámica en el crecimiento sería notorio.

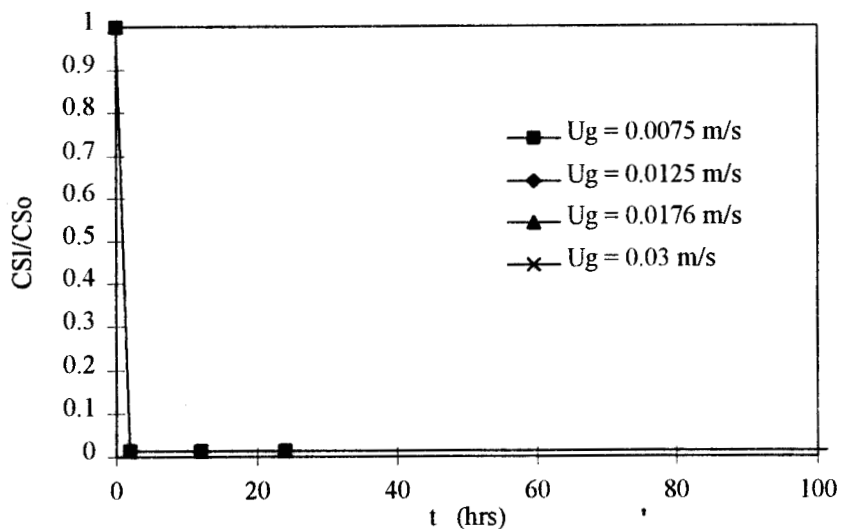


Fig. 5.14 Concentración de sustrato a la salida del reactor en función del coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líqu.

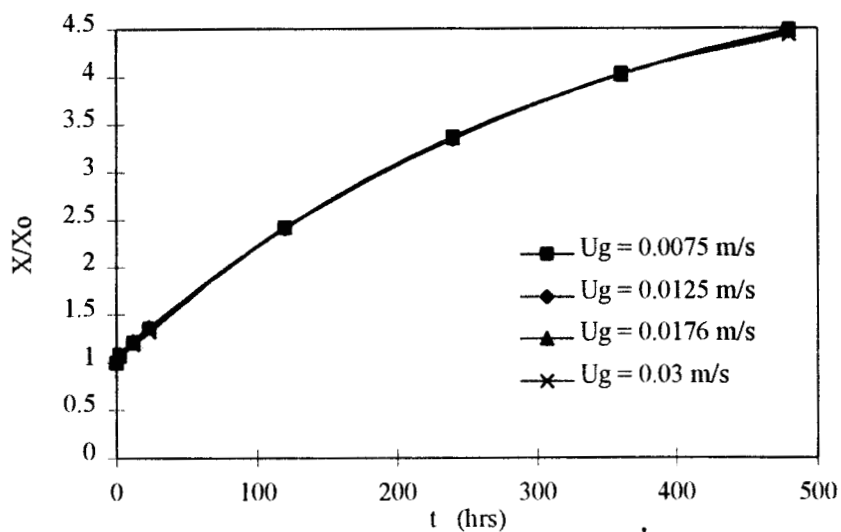


Fig. 5.15 Concentración de biomasa en función del coeficiente de transferencia de masa en la interfase gas-líqu.

## 5.4 EFECTO EN EL COMPORTAMIENTO UTILIZANDO DIFERENTES TÉRMINOS EN LA CINÉTICA DE CRECIMIENTO

La mayoría de los modelos utilizados para describir el crecimiento microbiano son modelos que se obtienen a partir de la observación del comportamiento de un cultivo en un reactor por lotes. Un modelo que describa completamente el metabolismo y comportamiento real de una sola célula sería complicado y difícil de resolver. En este trabajo, se realizaron simulaciones empleando diferentes cinéticas de crecimiento con el fin de analizar y comparar los resultados numéricos y poder decidir cual modelo de crecimiento describe con mas detalle el comportamiento observado del sistema experimental. Las cinéticas que se emplearon se muestran a continuación.

### I. Cinética Tipo Monod.

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{máx} \left( \frac{C_s}{k_s + C_s} \right) X \quad (5.1)$$

$$\text{C.I. a } t = 0 \quad X = X_0$$

### II. Inhibición por Biomasa.

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{máx} \left( \frac{C_s}{k_s + C_s} \right) \left( 1 - \frac{X}{X_{máx}} \right) X \quad (5.2)$$

$$\text{C.I. a } t = 0 \quad X = X_0$$

### III. Limitación por Oxígeno e Inhibición por Biomasa.

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{máx} \left( \frac{C_s}{k_s + C_s} \right) \left( \frac{C_{O_2}}{k_{O_2} + C_{O_2}} \right) \left( 1 - \frac{X}{X_{máx}} \right) X \quad (5.3)$$

$$\text{C.I. a } t = 0 \quad X = X_0$$

IV. Limitación por Oxígeno e Inhibición por Biomasa y Sustrato.

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{máx} \left( \frac{C_s}{k_s + C_s} \right) \left( \frac{C_{O_2}}{k_{O_2} + C_{O_2}} \right) \left( 1 - \frac{C_s}{C_{Smáx}} \right) \left( 1 - \frac{X}{X_{máx}} \right) X \quad (5.4)$$

C.I. a  $t = 0$   $X = X_0$

La cinética I describe el crecimiento microbiano limitado por la cantidad de sustrato, esta cinética es la conocida como cinética de Monod que es un caso particular de la cinética de Michaelis-Menten. A diferencia de la cinética I, la cinética tipo II contiene un término que describe el crecimiento el cual puede ser inhibido por una concentración elevada de biomasa. Este tipo de inhibición por sustrato es de tipo Loung. La concentración de biomasa máxima que se considera para estas simulaciones corresponde a un 200 % de la inicial, es decir,  $X_{máx}$  es igual a 3 unidades adimensionales.

La cinética tipo III contiene los términos de la cinética II, la diferencia es que para la primera se adiciona un término de limitación de crecimiento por oxígeno. La cinética IV puede ser considerada como la que describe con mayor detalle el comportamiento observado experimentalmente, en esta cinética se introduce un término que inhibe el crecimiento de la biomasa debido a altas concentraciones de sustrato, recordemos que la mayoría de los sustratos inhiben el crecimiento cuando existen en concentraciones mayores a las permisibles por los microorganismos. Para las simulaciones realizadas utilizando la cinética tipo IV el valor se  $S_{máx}$  fue de 1.2 unidades Chávez-Rivera (1994). Los valores de los parámetros de transporte y cinéticos fueron los utilizados en el capítulo 4. El tiempo de residencia que se empleo para estas simulaciones fue de 2 horas.

Los perfiles de oxígeno en la fase gas que se obtienen utilizando las cinéticas arriba mencionadas se muestran en la Fig. 5.16. En el caso en el cual se utilizó la cinética de tipo Monod se observa una tasa de transferencia de oxígeno constante en todo el proceso a diferencia de la cinética IV. Para la cinética tipo Monod se considera que el oxígeno no es una especie que limita el crecimiento si no que se encuentra en exceso en el sistema. En el caso de las cinéticas Tipo II y III se observa que para tiempos mayores a 3 días el sistema se localiza en el estado estacionario trivial, donde, las concentraciones de entrada de las especies son iguales a las concentraciones de salida.

Esto se debe, como se observará en la Fig. 5.19, a que la biomasa alcanza la máxima concentración permisible, fijada para un valor del 200 % de la inicial. Una vez alcanzada esta concentración el modelo no permite que la biomasa crezca mas de 3 unidades adimensionales. La cantidad de microorganismos máxima, que se permite tener dentro del reactor, no es capaz de remover el sustrato observándose que el reactor tiene los mismos valores de las concentraciones a la entrada y a la salida.

La Fig. 5.17 muestra los perfiles de concentración de oxígeno en la fase líquida. En el caso de la cinética tipo III, los perfiles muestran un comportamiento similar a los resultados discutidos en la sección 4.3. La diferencia que existe con respecto a los dos conjuntos de resultados es que la concentración de biomasa a los 20 días utilizando la cinética Tipo IV es ligeramente menor si utilizamos la cinética de crecimiento que presenta el modelo original.

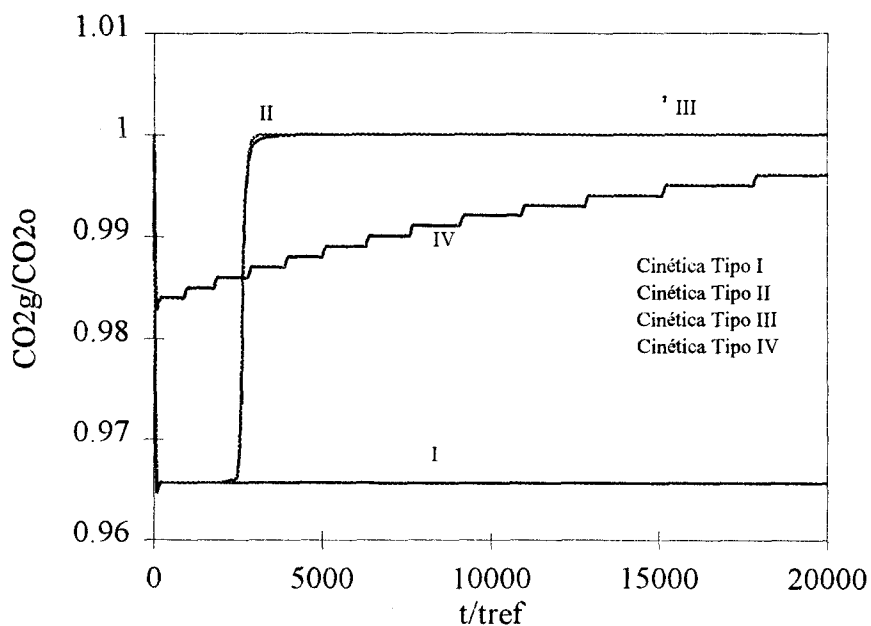


Fig. 5.16 Concentración de oxígeno en la fase gas empleando diferentes cinéticas de crecimiento.

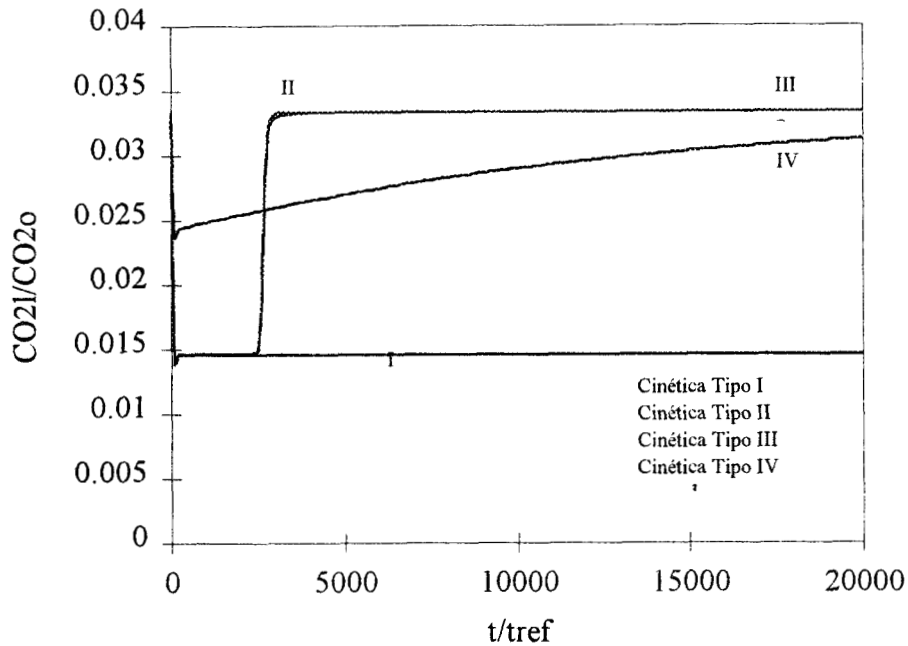


Fig. 5.17 Concentración de oxígeno en la fase líquida empleando diferentes cinéticas de crecimiento.

La Fig. 5.18 muestra los perfiles de concentración de sustrato para las cuatro cinéticas empleadas en esta sección. Como se observa, la cinética de Monod y tipo IV que incluye términos de inhibición por sustrato y biomasa, muestran perfiles similares; el consumo de sustrato es cercano al 100 % a diferencia de los resultados que se obtienen al utilizar las cinéticas tipo II y III. En estos casos se observa las mismas concentraciones de sustrato a la entrada y a la salida, esto se debe a que la biomasa alcanza el máximo valor fijado en tres unidades. Esta concentración de biomasa no es suficiente para poder remover la cantidad de sustrato que entra al reactor produciéndose el efecto antes mencionado. Si  $X_{m\acute{a}x}$  fuera mayor que 3 se tendría un efecto similar a los resultados cuando se utiliza la cinética tipo IV debido a que se tendría una menor restricción por parte de la inhibición por biomasa.



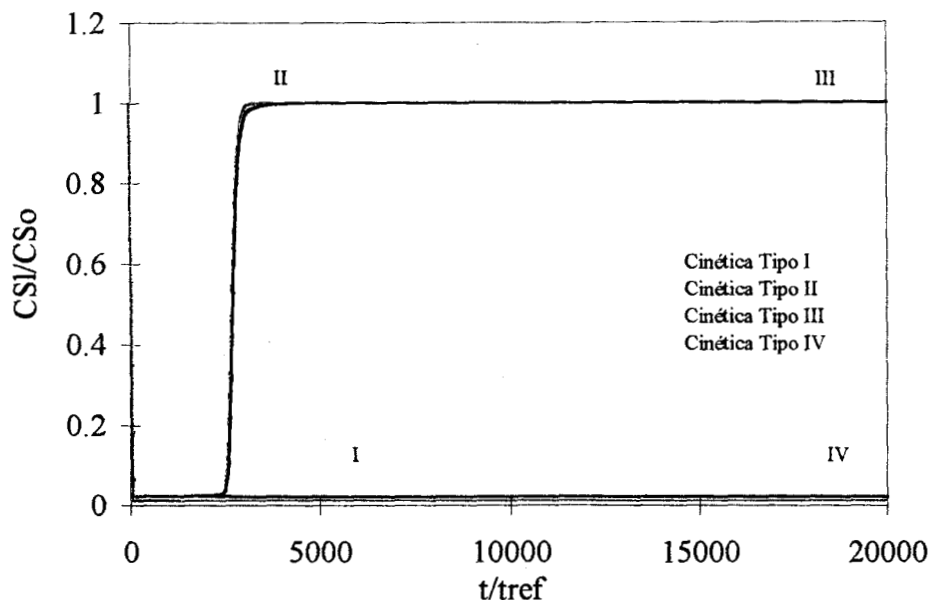


Fig. 5.18 Concentración de sustrato empleando diferentes cinéticas de crecimiento.

El crecimiento microbiano se puede apreciar en la Fig. 5.19. Como se observa en esta figura, la concentración de biomasa utilizando las cinéticas II y III permanece constante a partir de tres días. Si comparamos las concentraciones utilizando la cinética de Monod y la tipo IV existen grandes diferencias. En el primer caso se observa una relación lineal en el crecimiento como función del tiempo la cual tiene la forma  $X = 7.5 \times 10^{-4} \theta + 1$ .

La cantidad de biomasa en función del tiempo para un cultivo por lotes esta descrita por una función exponencial. La relación lineal que describe los resultados numéricos puede incluir desviaciones que se deben al error numérico o debido a que la velocidad de crecimiento específico es muy grande y con esto la cinética de Monod tenga desviaciones (Quintero, 1983).

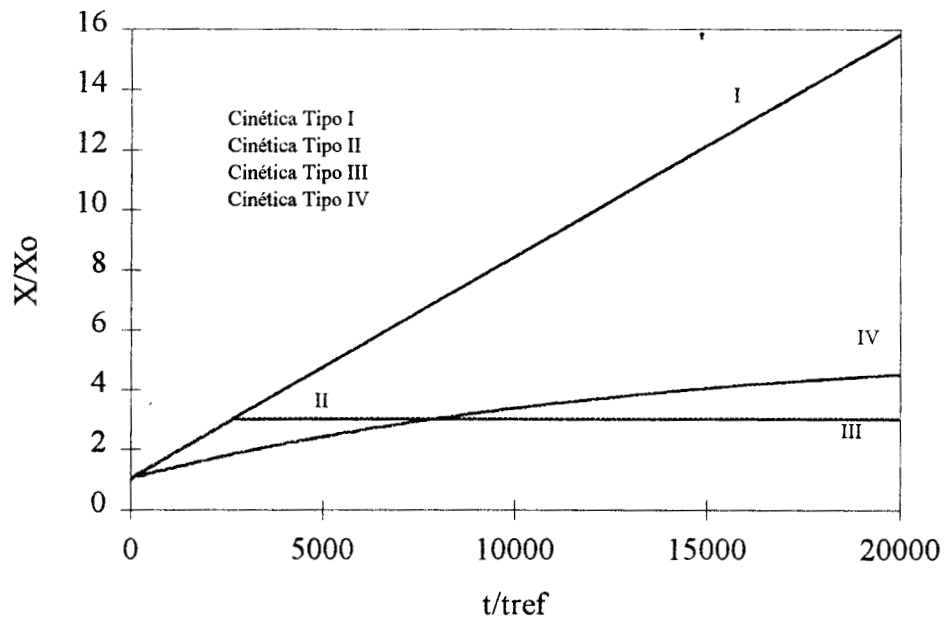


Fig. 5.19 Crecimiento de biomasa con diferentes cinéticas de crecimiento.

## **CAPITULO 6**

# **CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS**

### **6.1 CONCLUSIONES**

La simulación es una herramienta que permite estudiar y analizar el comportamiento de sistemas en donde se lleva a cabo cualquier proceso químico o bioquímico para diferentes condiciones de operación y parámetros cinéticos y de transporte, sin realizar grandes esfuerzos experimentales.

El modelo matemático fue resuelto, para cada simulación, utilizando diversos valores en el flujo de líquido y del gas a la entrada del reactor. Los parámetros cinéticos y de transporte que se utilizaron para obtener los resultados numéricos mostrados en el capítulo cuatro y cinco fueron obtenidos experimentalmente, en el caso de los cinéticos, y mediante correlaciones empíricas en el caso de los parámetros de transporte. Los parámetros físicos utilizados corresponden a las

---

dimensiones reales del equipo experimental. El objetivo de utilizar los mismos parámetros, tanto cinéticos, de transporte y físicos fue el tener un marco de comparación entre los resultados experimentales y los numéricos.

La solución numérica del modelo proporcionó los valores de las concentraciones de oxígeno en la dirección axial del reactor para la fase gas. Las concentraciones de sustrato y biomasa en las fases en que están definidas y estas concentraciones están referidas a la salida del reactor.

Los perfiles de concentración de oxígeno en la fase gas con respecto a la posición axial muestran un comportamiento similar cuando se varía el tiempo de residencia. Este comportamiento refleja un incremento en los valores para las concentraciones de oxígeno en esta fase. Es decir, para un tiempo de dos horas después del arranque del reactor ( $t=0$ ) se observa cantidades relativamente menores con respecto a tiempos de 10, 15 y 20 días. Si comparamos los perfiles cuando se cambia el tiempo de residencia del líquido podemos concluir que para tiempos de residencia mayores la tasa de consumo de oxígeno y por lo tanto la tasa de transferencia es menor ya que se observan cantidades mayores de oxígeno en la fase gas.

Al incrementar el tiempo de residencia implícitamente disminuimos el flujo del líquido y por lo tanto la cantidad de sustrato que entra al reactor. El comportamiento mencionado con anterioridad puede ser explicado de la siguiente manera. Un tiempo de residencia menor tendrá como consecuencia mayores cantidades de sustrato que entran al reactor; la cantidad de biomasa depende directamente de la cantidad de sustrato presente, por lo tanto si hay mayores cantidades de sustrato la biomasa necesita mayores cantidades de oxígeno para llevar a cabo la eliminación del sustrato. Es por eso que se observan cantidades menores de oxígeno en las tres fases cuando se utilizan tiempos de residencia menores. Resultados experimentales muestran que grandes cantidades de biomasa propician problemas de corrosión y transferencia de masa y calor principalmente, por lo tanto, los resultados numéricos obtenidos en este trabajo sugieren la utilización de tiempos de residencia grandes ya que estos proporcionan cantidades de biomasa menores y una tasa de consumo de sustrato mayor. La desventaja operacional es que se necesitaría mayor tiempo para eliminar concentraciones mayores de sustrato con respecto a la concentración de alimentación utilizada para las simulaciones numéricas. Este problema podría ser resuelto si se construyera un reactor biológico de mayor volumen.

---

Los modelos que describen reactores biológicos que utilizan microorganismos aeróbios deben considerar balances de oxígeno en dos o tres fases. La mayoría de los autores no se interesan por estudiar los efectos que pueda tener la transferencia y el consumo de oxígeno en la eficiencia del proceso argumentando que es un reactivo en exceso. Sin embargo, los efectos son notables como muestran los resultados de este trabajo.

Las corridas numéricas utilizando 6 y 12 puntos interiores de colocación no presentan diferencias cuantitativas, es decir los perfiles de concentración son los mismos. Esto se debe posiblemente a los parámetros cinéticos y de transporte utilizados y a la estructura del sistema de ecuaciones que se obtienen como modelo del sistema. La desventaja de utilizar 12 puntos interiores es que las corridas numéricas consumen mayor tiempo de computo, cerca de 25 horas a comparación de 5 horas que es el tiempo de computo que tarda una simulación que utiliza 6 puntos interiores de colocación. Para la solución del sistema modelado es suficiente utilizar 6 puntos interiores de colocación ya que los perfiles que se obtienen son lineales.

Chávez-Rivera (1994) reporta en su trabajo experimental que la eliminación de sustrato es de cerca del 100 %. Los resultados numéricos obtenidos en este trabajo logran reproducir la tasa de eliminación de sustrato observada por él.

En plantas de tratamiento de aguas residuales es común tener cambios en las cantidades de contaminantes a tratar; estas cantidades dependen del flujo másico o de la cantidad de producto secundario que es desechado hacia la planta de tratamiento. Como es sabido, una gran mayoría de compuestos orgánicos son tóxicos para los microorganismos ya que pueden inhibir o eliminar el crecimiento celular. Por lo tanto es necesario conocer la capacidad de la población para resistir concentraciones mayores y cambios repentinos en la concentración de sustrato o contaminante. Los resultados obtenidos en este trabajo predicen una relativa resistencia a cambios en la concentración de alimentación de contaminante. Se utilizaron diferentes cantidades de sustrato a la entrada del reactor observándose la eliminación de este en su totalidad, las cantidades de oxígeno y de biomasa observadas varían en forma directa con la cantidad de sustrato como se explico en los capítulos anteriores, pero se puede concluir que la biomasa tiene la capacidad de amortiguar concentraciones mayores de sustrato.

---

Una forma de observar el comportamiento dinámico del sistema es introducir cambios repentinos en la concentración de sustrato y en el tiempo de residencia una vez que se ha alcanzado el estado estacionario. Los resultados mostrados en la sección 5.2 muestran que el sistema puede soportar cambios repentinos en la concentración de sustrato y en el tiempo de residencia, por lo cual se puede concluir que el reactor es estable.

Los resultados numéricos obtenidos cuando se realizan cambios repentinos en la concentración de sustrato a la entrada, representan cualitativamente los obtenidos experimentalmente por Chavéz-Rivera (1994). En nuestro caso, existe una diferencia en la magnitud del escalón que es menor con respecto a los resultados experimentales y el tiempo en regresar al estado estacionario es mayor.

Los estados estacionarios que se observan en los resultados obtenidos en este trabajo son dos. El primero corresponde a una eliminación de sustrato cercana al 100 % y el segundo a una eliminación cero, es decir, que la concentración de entrada de las especies es igual a la de salida. Estos dos estados fueron encontrados experimentalmente por Chavéz-Rivera (1994).

La hidrodinámica de un reactor biológico debe de tomarse en cuenta para el diseño y el escalamiento de estos sistemas. Los resultados obtenidos en este trabajo sugieren que la hidrodinámica no tiene ningún efecto en la eficiencia del sistema ya que se observa una misma tasa de eliminación y crecimiento celular cuando se varían los coeficientes de transferencia en la interfase. Posiblemente este comportamiento se deba a que la biopelícula es considerada como un catalizador externamente depositado, por lo cual no existan resistencias difusionales dentro de la biopelícula. Se ha demostrado experimentalmente que estas resistencias son las que dominan el proceso biológico. Para el sistema modelado en esta trabajo, el crecimiento es independiente de la hidrodinámica del reactor.

El oxígeno es un componente importante en el sistema ya que la baja concentración de este limita notoriamente el crecimiento microbiano y la eliminación de sustrato teniéndose como consecuencia un tiempo de eliminación mayor.

Las cinéticas de crecimiento que contienen un término de inhibición por biomasa no favorecen la eliminación de sustrato cuando los valores de  $X_{max}$  son relativamente menores. En el caso de los resultados numéricos obtenidos en la sección 5.4, sería inconveniente utilizar una

---

concentración de biomasa máxima de crecimiento de tres unidades adimensionales ya que esta cantidad no sería suficiente para remover la concentración de sustrato que se esta alimentando. Podría establecerse una concentración máxima de crecimiento de biomasa de las tres cuartas partes de la concentración alcanzada en la sección 4.4; la cual podría representar la magnitud total de biomasa en presencia de muerte y desprendimiento por efectos cortantes. Sin embargo, las concentraciones grandes de biomasa encontradas en este trabajo están soportadas por los resultados experimentales obtenidos por Freitas dos Santos y Livingston (1995).

La cinética de Monod que se emplea para comparar resultados numéricos utilizando diferentes términos de inhibición y limitación no tiene un comportamiento exponencial como podría esperarse, en vez de esto se tiene un comportamiento lineal. Una razón podría ser que velocidad de crecimiento específico es muy grande observándose la desviación antes mencionada (Quintero, 1981).

En general, el modelo del reactor biológico describe el comportamiento fenomenológico del sistema, al suponer actividad externa en la biopelícula. Una descripción mas detallada para la fase sólida sería adicionar una resistencia difusional intrapartícula e interpartícula. Obviamente el precio sería grande ya que las ecuaciones tendrían otra estructura con mayor dificultad numérica para resolver.

## 6.2 PERSPECTIVAS O TRABAJOS A FUTURO

Se ha discutido con anterioridad que las resistencias difusionales dentro de la biopelícula juegan un papel importante en sistemas donde se hace crecen un acumulado de microorganismos en un soporte catalítico. El modelo que se construyó y se resolvió en este trabajo carece de un termino que describa la difusión de masa dentro de la biopelícula. Un modelo que describa con mayor detalle el comportamiento fenomenológico del reactor debería de contemplar el termino de difusión dentro de la biopelícula además de un término que describa el mezclado en la posición axial y/o radial. La desventaja de introducir estos términos en le modelo matemático se reflejaría en la dificultad para resolver el sistema de ecuaciones, pero sin duda, la descripción física del sistema sería completa.

---

**BIBLIOGRAFIA**

Aarne, V.P., Jeffrey, P.J. y Weiner, R.F. (1989), *Environmental Pollution and Control*. London, Butterworth-Heinemann.

Acrivos, A. (1956), "Method of Characteristic Technique: Application to Heat and Mass Transfer Problems." *Ind. and Eng. Chemistry*. **48**: 703-710.

Akita, K. y Yoshida, F. (1974), "Bubble Size, Interfacial area, y Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns." *Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop.* **13(1)**: 84-91.

American Society for Testing and Materials (1982), *Manual de Aguas para Usos Industriales*, México, Limusa.

Ames, W.F. (1965), "No Linear Differential Equation in Engineering". Academic Press, New York.

Andrew, S.P.S. (1982), "Gas-Liquid Mass Transfer in Microbiological Reactors." *Trans. I. Chem. E.* **60**: 3-13.

Andreyeva, L.N. y Biryukov, V.V (1973), *Biotechnology. Bioeng. Symp.*, No.4,61

Atkinson, B., Daoud, I.S. y Williams D.A. (1968), "A Theory for the Biological Film Reactor", *Trans. Inst. Chem. Engrs.* **46** : T245-T250.

Bailey, J.E. y Ollis, D.F. (1986), *Biochemical Engineering Fundamentals*. New York. McGraw-Hill Book Company.

de Beer, D. y Stoodley, P. (1995), "Relation Between the Structure of an Aerobic Biofilm and Transport Phenomena". Trabajo presentado en The Int. Conf. Workshop on Biofilm Structure, Growth and Dynamics, Noordwijkerhout. The Netherlands, 30. Aug.- 1. Sept. 1995.

Bothast, R. J. Slinger, P. J. y Shimizu G. P. (1989), "Bioreactor", *Biomass Handbook*, Gordon and Breach Science Publishers, cap 4.5, pag 779-801.

Calderbank, P.H. (1960). *Mass Transfer in Fermentation Equipment*. 102- 180.

Characklis, W. G. (1983). "Process Analysis in Microbial Systems : Biofilms as a Case Study", *Mathematics in Microbiology*, Academic Press, London.

Characklis, W.G. y Wilderer, P.A. de. (1989). *Structure and Function of Biofilms*. Dahlem Workshop Reports. John Wiley & Sons, Inc.

---



Chávez-Rivera, R.A. (1994). Studies on a Packed-Bed Reactor for Biodegradation of Chlorinated Aromatic Hydrocarbons. PhD Dissertation, Department of Chemical Engineering, University of Cambridge. U. K.

Caunt, P. y Chase, H.A. (1988). "Biodegradation by Bacteria Immobilised on Celite Particles." *Bio/Technology* **6**(6): 721-725.

Cunningham, A. B., Visser, E., Lewandowski, Z. y Abrahamson, M. (1995). "Evaluation of a Coupled Mass Transport-Biofilm Process Model Using Dissolved Oxygen Microsensor" . Trabajo presentado en The Int. Conf. Workshop on Biofilm Structure, Growth and Dynamics, Noordwijkerhout. The Netherlands, 30. Aug.- 1. Sept. 1995.

Denn, M.M. (1986) "Process Modeling", John Wiley & Sons, Inc.

Douek R., Livingston A., Hewitt Geoff., (1993). "The Hidrodynamics of Three-Phase Airlift Reactor", Internal Report, Imperial College, Londres.

ECC (1976). " Council Directive of 4 May 1976 on pollution caused by certain dangerous substances discharged into the aquatic environment of the Community (76/464/EEC)." *Official Journal of the European Communities* **L 129** : 23-29.

EEC (1982). "Communication from the Commission to the Council on dangerous substances which might be included in List Y of the Council Directive 76/464/EEC." *Official Journal of the European Communities* **L 176** : 3-10.

Finlayson, B.A. (1972). *The Method of the Weighted Residuals and Variational Principles.*, Academic Press, New York

Finlayson, B.A. (1980). *Non Linear Analysis in Chemical Engineering.* MacGraw-Hill. New York

Freitas do Santos, L.M., Livingston, A.G. (1995). "Membrane-Attached Biofilms for VOC Wastewater Treatment I: Novel In Situ Biofilm Thickness Measurement Technique", *Biotechh. and Bioeng*, **47**: 82-89.

Freitas do Santos, L.M., Livingston, A.G. (1995). "Membrane-Attached Biofilms for VOC Wastewater Treatment II: Efect of Biofilm Thickness on Performance", *Biotechh. and Bioeng*, **47**: 90-95.

Froment, G.F. y Bischoff, B.K. (1979). *Chemical Reactor Analysis and Design.* John Wiley & Sons, Inc. New York.

de Gooijer C. D., Wijffels R. H y Tramper J. (1991) "Grow and Substrate Consumption of *Nitrobacter agilis* Cells Immobilized in Carrageenan: Part I. Dynamic Modeling", *Biotechh. and Bioeng*. **38**: 224-231.

---

- Howell, J.A. (1983). *Mathematical Models in Microbiology*. in *Mathematics in Microbiology*. Academic Press, New York.
- Kawase, Y., Halard, B., Moo-Young, M. (1992). "Liquid-Phase Mass Transfer Coefficients in Bioreactors", *Biotech. and Bioeng.* **9**: 1133-1140.
- Lapidus, L. (1962). *Digital Computation for Chemical Engineers*. McGraw Hill
- Lehninger, A.L (1975) *Biochemistry*, New York, Worth Publishers, Inc.
- Levenspiel, O. (1972). *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley and Sons, Inc. New York
- Levenspiel, O. (1980). "The Monod Equation: A Revisit and Generalization to Product Inhibition Situation." *Biotechh. Bioeng.* **22**: 1671-1687.
- Lewandowski, Z. Walser, G. y Characklis, G.W. (1991) "Reaction Kinetics in Biofilms", *Biotech. and Bioeng.*, **38** : 877-882.
- Leyva-Ramos, R., Fan, L.S., Wisecarver, K.D. y Zehner, B.J. (1989) "Difussion of Phenol through a Biofilm Grow on Activated Carbon Particles in a Draf-Tube Three-Phase Fluidized-Bed Bioreactor", *Biotech. and Bioeng.* **35** : 279-286.
- Livingston, A.G. (1989). *Biodegradation of Toxic Waste by Immobilized Microorganisms*. Tesis Doctoral, Departamento de Ingenieria Química, Universidad de Cambridge, UK.
- Livingston, A.G. y Chase, H.A. (1990). "Liquid-Solid Mass Transfer in a Three Phase Draf Tube Fluidized Bed Reactor." *Chem. Eng. Comm.* **92**: 225-244.
- Luong, J.H.T. (1987). "Generalization of Monod Kinetic for Analysis of Growth Data with Substrate Inhibition." *Biotechh. Bioeng.*, **29**: 242-248.
- Melick, M.R., Karim, M.N., Linden, J.C., Dale, B.E. y Mihaltz, P. (1987). "Mathematical Modeling of Ethanol Production by Immobilized *Zymomonas mobilis* in a Packed Bed Fermenter". *Biotech. and Bioeng.* **24**: 370-382.
- Metcalf y Eddy, Y. (1991). "Wastewater Engineering: Treatment, Disposal y Reuse". McGraw-Hill Book Company.
- Michelsen, M.L. y Villadsen, J. (1980). "Foundation of Computer Aided Chem. Process Design Conference Henniker", New Hamshire.
- Monod, J. (1942). *Recherches sur la Croissance des Culteres Bacteriennes*. Paris, Hermann.
- Moo-Young, M. y Blanch, H.W. (1981). "Design of Biochemical Reactors. Mass Transfer Criteria for Simple and Complex Systems." *Advances in Biochemical Engineering*, **19**, 2-69.
-

Moo-Young, M. y Blanch, H.W. (1987). "Transport Phenomena and Bioreactor Design", Basic Biotechnology, Academic Press, cap 5, : 133-168.

Okabe, S., Hirata, K. y Watanabe, Y. (1995). "Dynamics Changes in Spatial Microbial Distribution in Mixed Population Biofilms: Experimental Results and Model Simulation". Trabajo presentado en The International. Conf. Workshop on Biofilm Structure, Growth and Dynamics, Noordwijkerhout. The Netherlands, 30. Aug.- 1. Sept. 1995.

Ottengraf, S. P. P. y Van den Oever, A. H. C. (1983). "Kinetic of Organic Compound Removal from Waste Gases with a Biological Filter". Biotechh. and Bioeng. **25**: 3089-3102.

Papathanasiou D. T., Kalogerakis N. y Behie A. L. (1988) "Dynamic Modelling of Mass Transfer Phenomena with Chemical Reaction in Immobilized-Enzyme Bioreactors". Chem. Eng. Science. **43**: 1489-1498.

Quintero, R.R. (1981). Ing. Bioquímica, Teoría y Aplicaciones. Alhambra.

Ratledge, C. (1987) "Biochemistry of Growth and Metabolism". Basic Biotechnology. John Bu'Lock, Bjorn Kristansen Edt. Academic Press.

Revah, M.S. (1981) "Ingeniería de las Reacciones Bioquímicas : Fundamentos" UAM-I, SEP.

Sáez, P.B., y Rittmann, B.E. (1988). "Improved Pseudoanalytical Solution for Steady-State Biofilm Kinetics." Biotechh. Bioeng. **32**(3), 379-385.

Shah, Y.T., Kelkar, B.G., Godbole, S.P. y Dekwer, W.D. (1982). "Design Parameter Estimation for Bubble Column Reactors." AIChE J. **28**(3): 353-379.

Skowlund, T.C., Kirmse, W.D. (1989) "Simplified Models for Packed-Bed Biofilm Reactor", Biotech. and Bioeng., **33**: 164-172.

Stewart, P. S. (1992) "A Model of Biofilm Detachment", Biotech and Bioeng, **41**: 111-117

Sundstro, D. W., Klel, H. E. y Brookman, G. T. (1976). "Response of Biological Reactors to Sinusoidal Variation of Substrate Concentration." **18**: 1-14.

Villadsen, J. y Michellsen, M. L. (1978). Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation. Prentice Hall.

Wagner K. y Hempell D. C. (1988) "Biodegradation by Immobilized Bacteria in an Airlift-Loop Reactor : Influence of Biofilm Diffusion Limitation." Biotechh. and Bioeng. **31** : 559-566.

Winkler, M.A. (1988) Principles of Biotechnology, Alan Wiseman, Surrey University Press.

Worden M. R. y Donaldson L. T. (1987) "Dynamics of Biological Fixed Film for Phenol Degradation in a Fluidized Bed Bioreactor." Biotechh. and Bioeng. **30**: 398-412.

## **APÉNDICE A**

### **MÉTODOS NUMÉRICOS DE SOLUCIÓN**

#### **A.1 MÉTODO DE LAS CARACTERÍSTICAS**

El método de las características es una técnica numérica poderosa que se utiliza para resolver ecuaciones diferenciales parciales de tipo hiperbólico, el cual es descrito en la literatura (Acrivos, 1965; Lapidus, 1962; Ames, 1965).

El procedimiento desarrollado por Lapidus 1962, esta descrito a continuación utilizando las ecuaciones de los balances de masa para oxígeno en las tres fases

---

$$\frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial u}{\partial \xi} = -A_1 \left( \frac{u}{H} - v \right) \quad (\text{A.1})$$

C.I. @  $\theta = 0$      $u = u_{\text{eq}}$   
 C.F. en  $\xi = 0$      $u = 1$

$$\frac{dv}{d\theta} = A_2(v_o - v) + A_3 \left( \frac{u}{H} - v \right) - A_4(v - w) \quad (\text{A.2})$$

C.I. @  $\theta = 0$      $v = v_{\text{eq}}$

$$\frac{dw}{d\theta} = A_6(v - w) - \left[ A_5 \left( \frac{r}{K_s + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{\Gamma_{\text{máx}}} \right) \chi \right] - M_{O_2} \chi \quad (\text{A.3})$$

C.I. a  $\theta = 0$      $w = w_{\text{equ}}$

donde     $A_1 = t_{\text{ref}} K_{LS} a_{vb}$      $A_2 = \theta_t$      $A_3 = A_1 \theta_{\text{egl}}$

$$A_4 = t_{\text{ref}} k_{ls} a_{vls} \quad A_5 = \frac{X_O \mu_{\text{máx}} t_{\text{ref}}}{Y_{X/O_2} C_{O_2o}}$$

Las derivas con respecto a  $\theta$  y  $\xi$  para  $u$ ,  $v$ , y  $w$  son :

$$du = \frac{\partial u}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial u}{\partial \xi} d\xi \quad (\text{A.4})$$

$$dv = \frac{\partial v}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial v}{\partial \xi} d\xi \quad (\text{A.5})$$

$$dw = \frac{\partial w}{\partial \theta} d\theta + \frac{\partial w}{\partial \xi} d\xi \quad (\text{A.6})$$

Las ecuaciones (A.1) a (A.6) pueden ser consideradas como ecuaciones simultáneas cuyas incógnitas son  $\frac{\partial u}{\partial \theta}$ ,  $\frac{\partial u}{\partial \xi}$ ,  $\frac{\partial v}{\partial \theta}$ ,  $\frac{\partial v}{\partial \xi}$ ,  $\frac{\partial w}{\partial \theta}$ ,  $\frac{\partial w}{\partial \xi}$  respectivamente. Las ecuaciones para cada variable pueden ser agrupadas en forma matricial para obtener los determinantes cuyo valor es igual a cero, que indican los valores característicos

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ d\theta & d\xi \end{bmatrix} = 0 = d\xi - d\theta$$

por lo tanto,

$$\left. \frac{d\xi}{d\theta} \right|_{\text{I}} = 1 \quad \text{para la curva característica I} \quad (\text{A.7})$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ d\theta & d\xi \end{bmatrix} = 0 = d\xi$$

$$\xi \Big|_{\text{II}} = \text{constante para la curva característica II} \quad (\text{A.8})$$

y

$$\xi \Big|_{\text{III}} = \text{constante para la curva característica III} \quad (\text{A.9})$$

sustituyendo las ecuaciones (A.7), (A.8) y (A.9) en (A.4), (A.5) y (A.6) respectivamente

$$\left. \frac{du}{d\xi} \right|_{\text{I}} = \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial u}{\partial \xi} = -A_1 \left( \frac{u}{H} - v \right), \quad (\text{A.10})$$

$$\left. \frac{dv}{d\theta} \right|_{\text{II}} = \frac{dv}{d\theta} = A_2(v_0 - v) + A_3 \left( \frac{u}{H} - v \right) - A_4(v - w) \quad (\text{A.11})$$

$$\left. \frac{dw}{d\theta} \right|_{III} = \frac{dw}{d\theta} = A_6(v - w) - \left[ A_5 \left( \frac{r}{K_s + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{máx}} \right) \chi \right] \quad (A.12)$$

El sistema original de EDPH ha sido reducido a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias a lo largo de las curvas características especificadas por las ecuaciones (A.7), (A.8) y (A.9).

## A.2 MÉTODO DE COLOCACIÓN ORTOGONAL

La teoría y las técnicas del método de colocación ortogonal son presentados por Villadsen & Stewart (1967), Villadsen (1970), Finlayson (1972, 1974) y Villadsen & Michelsen (1978). El método es brevemente descrito para el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que se obtienen al utilizar el método de las características.

El método de colocación ortogonal es un caso especial del método de colocación que es una clasificación de los métodos de residuos ponderados. En este método se requiere encontrar soluciones aproximadas a las ecuaciones que resultan del modelo de la forma lineal

$$y(x) \approx y_N(x) = y_0(x) + \sum_{i=1}^N a_i y_i(x) \quad (A.13)$$

donde  $y_i(x)$  son funciones de la posición, de las cuales se seleccionan de tal forma que las condiciones de frontera se satisfacen, y los coeficientes  $a_i$  se determinan de tal forma que la ecuación diferencial se satisfice.

En el método de colocación se requiere que la ecuación diferencial sea cero en el grupo de puntos, llamados puntos de colocación. Las funciones de prueba son sustituidas dentro de la ecuación diferencial y el resultado es llamado residuo. El residuo puede ser cero en todo el rango de la función que generalmente esta entre 0 y 1 para la solución exacta de  $y(x)$ . En los puntos de colocación el residuo tiene que ser cero y así determinar los coeficientes en las funciones de prueba.

Hay dos clases de problemas que son normalmente encontrados dependiendo del sistema de ecuaciones diferenciales. La primer clase son los conocidos como sistemas simétricos en donde la solución es simétrica alrededor de  $x=0$  por ejemplo, perfiles de concentración y temperatura en la dirección radial, para ello la función de prueba tienen la forma

$$y(x^2) \cong y_N(x^2) = b + (1-x^2) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(x^2) \quad (\text{A.14})$$

el segundo caso en donde no existe simetría de la solución, por ejemplo, perfiles de concentración y temperatura en la dirección axial, para este tipo de sistemas las funciones de prueba son de la forma

$$y(x) \cong y_N(x) = b + Cx + x(1-x) \sum_{i=1}^N a_i P_{i-1}(x) \quad (\text{A.15})$$

En ambos casos,  $N$  es el número de puntos interiores de colocación los cuales son elegidos como ceros de polinomios ortogonales  $P_N(x)$ . Cuando los puntos de colocación son ceros de algún polinomio de Jácobi, el método de colocación es llamado colocación ortogonal. En las ecuaciones anteriores  $P_N(x^2)$  y  $P_N(x)$  son polinomios de Jácobi que satisfacen la siguiente condición de ortogonalidad:

$$\int_0^1 w(x) P_j(x) P_N(x) dx = 0 \quad (\text{A.16})$$

$j = 0, 1, 2, \dots, N-1$

donde  $w(x)$ , es una función de peso dada por :

$$w(x) = x^\beta (1-x)^\alpha \quad (\text{A.17})$$

Los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  caracterizan a los polinomios desplazados de Jácobi  $P_N(x) = P_N^{\alpha, \beta}(x)$  los cuales pueden expresarse mediante la siguiente fórmula de recurrencia



$$P_N(x) = P_N^{\alpha,\beta}(x) = Y_N x^N - Y_{N-1} x^{N-1} + Y_{N-2} x^{N-2} - \dots + (-1)^N Y_0 \tag{A.18}$$

con

$$Y_0 = 1$$

$$Y_{k+1} = (N - k)(N + \alpha + \beta + k + 1) / (k + 1)(\beta + k + 1) \tag{A.19}$$

donde  $k = 0, 1, 2, \dots, N - 1$  y  $\alpha, \beta > 1$

Si bien la selección de  $N, \alpha$  y  $\beta$  nos permite tener la flexibilidad de concentrar los puntos de colocación alrededor de la localización específica, Michelsen y Villandsen (1980) y Villandsen (1980) han demostrado que la selección de  $\alpha = 0$  y  $\beta = S^{-1/2}$ , donde  $S = 0, 1, 2$  para placas cilindros y esperas respectivamente, es optimo en términos de exactitud ya que para estos valores, colocación ortogonal es equivalente al método de Galerkin, el cual es superior a los otros métodos de residuos ponderados (Villansen y Michelsen, 1978). Esto es importante ya que para Galerkin existe un gran conocimiento a cerca de error de aproximación y velocidad de convergencia etc. y por lo tanto puede extenderse a colocación ortogonal.

Finalmente, puede ser mostrado que el gradiente del Laplaciano para la función  $y(x)$  esta dado por

$$\left. \frac{dy_N}{dx} \right|_{x=x_i} = \sum_{j=1}^{N+1} A_{ij} Y_n(x_j)$$

$$\nabla^2 y_N \Big|_{x=x_i} = \sum_{j=1}^{N+1} B_{ij} Y_n(x_j) \tag{A.20}$$

Las matrices  $\underline{A}$  y  $\underline{B}$  y  $x_i, y = 1, \dots, N$  con  $N+1=1.0$  son fácilmente calculados con el método dado por Villansen y Michelsen (1978). Estos también son tabulados para  $n < 3$  (Finlayson, 1972).

En este trabajo se resuelve la ecuación que escribe el comportamiento de oxígeno en la fase gas utilizando colocación ortogonal con  $\alpha, \beta = 0$  utilizando polinómios no simétricos con 6 y 12

puntos interiores de colocación. El sistema que resulta al discretizar con colocación ortogonal es el siguiente :

$$\left. \frac{du}{d\xi} \right|_{\text{I}} = \sum_{j=1}^{N+1} A_{ij} u_j = -A_1 \left( \frac{u}{H} - v \right) \quad (\text{A.21})$$

$$\left. \frac{dv}{d\theta} \right|_{\text{II}} = \frac{dv}{d\theta} = A_2(v_0 - v) + A_3 \left( \frac{u}{H} - v \right) - A_4(v - w) \quad (\text{A.11})$$

$$\left. \frac{dw}{d\theta} \right|_{\text{III}} = \frac{dw}{d\theta} = A_6(v - w) - \left[ A_5 \left( \frac{r}{K_s + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{\text{máx}}} \right) \chi \right] \quad (\text{A.12})$$

$$\frac{dS}{d\theta} = A_2(1 - S) - A_4(S - r) \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{dr}{d\theta} = A_6(S - r) - \left[ A_7 \left( \frac{r}{K_s + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{\text{máx}}} \right) \chi + M\chi \right] \quad (\text{A.23})$$

$$\frac{d\chi}{d\theta} = A_8 \left( \frac{r}{K_s + r} \right) \left( \frac{w}{K_{O_2} + w} \right) \left( 1 - \frac{r}{r_{\text{máx}}} \right) \chi \quad (\text{A.24})$$

donde las condiciones iniciales y las constantes son definidas en el Capítulo 3.

De la ecuación (A.21) la variable “u” es despejada para posteriormente ser sustituida en la ecuación (A.11) teniendo finalmente un sistema de ecuaciones diferenciales con valores iniciales que se resuelve simultáneamente utilizando Runge-Kutta de 4to. orden.