

DINÁMICA DE UN REACTOR BIOLÓGICO:

UN CASO DE DIFUSIÓN

Y REACCIÓN EN LA PELÍCULA

TESIS QUE PRESENTA LA

INGENIERO QUÍMICO

ELIZABETH LEÓN BECERRIL

PARA LA OBTENCIÓN DEL GRADO DE

MAESTRA EN INGENIERÍA QUÍMICA

AGOSTO 1996

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DINÁMICA DE UN REACTOR BIOLÓGICO:
UN CASO DE DIFUSIÓN Y REACCIÓN EN LA PELÍCULA

TESIS QUE PRESENTA LA
INGENIERO QUÍMICO
ELIZABETH LEON BECERRIL

PARA LA OBTENCION DEL GRADO DE
MAESTRA EN INGENIERÍA QUÍMICA

ASESORES

DR. RAFAEL CHÁVEZ RIVERA

DR. FELIPE LÓPEZ ISUNZA

MÉXICO, D.F A 16 DE AGOSTO 1996

AGRADECIMIENTOS

Esta tesis está dedicada a todas las personas que me han apoyado y brindado su amistad, y conocimientos. En especial, a mis padres, Héctor y Cristina, por su apoyo incondicional y comprensión en todo proyecto que he iniciado.

Quiero agradecer a mis asesores, los Doctores Rafael Chávez Rivera y Felipe López Isunza, por sus conocimientos, y sugerencias en el desarrollo de la tesis. A los sinodales, los Doctores Octavio Tonatihu Ramírez Reivich y Mariano Gutierrez Rojas por sus comentarios, y sugerencias que enriquecieron el documento final.

A mis amigos, Alejandro, Alma, Rafael, Paty, Ignacio y Angel, por sus opiniones y ayuda durante el desarrollo del proyecto. A Armando por su apoyo desde lejos.

A CONACyT por el apoyo económico brindado para la realización de este proyecto.

RESUMEN

En el presente trabajo se propone un modelo matemático para un reactor biológico que degrada contaminantes xenobióticos presentes en una corriente líquida. El modelo matemático describe la dinámica de un reactor aerobio de película inmovilizada ante cambios bruscos en la alimentación del sustrato inhibitorio y de su flujo de alimentación. Los datos cinéticos que se utilizan en las simulaciones corresponden a los de un sustrato xenobiótico común (3-4dicloroanilina).

El sistema modelado consiste en una película microbiana inmóvil y alimentación continua de aire y sustrato a un reactor tipo "air-lift". Las fases gas y líquida se consideran como un reactor continuo perfectamente mezclado, los balances de masa en la fase sólida describen los efectos de difusión en el interior de la película así como el crecimiento microbiano.

El modelo propuesto involucra a las tres fases del reactor, ya que en la mayoría de los trabajos realizados en este campo de investigación los modelos son en dos fases, la fase líquida y la fase sólida (película microbiana. Es importante señalar que los modelos antes citados suponen una concentración de microorganismos fija, sin embargo en el presente modelo se considera un cambio en la concentración de microorganismos a través de la película, analizando su comportamiento en diferentes puntos en el espesor de ésta.

Se considera importante el simular la dinámica y el análisis de los efectos en las tres fases que conforman el reactor, ante cambios de alimentación del sustrato orgánico ya sea en su concentración, como en el flujo de alimentación, debido a que el volumen y calidad de los flujos de agua residual no son constantes en una planta de tratamiento.

ÍNDICE

Agradecimientos	iii
Resumen	iv
Índice	v
Nomenclatura	viii
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Generalidades	1
1.2 Contaminación del Agua	2
1.3 Volumen y Calidad de Flujos Residuales	3
1.4 Selección de Procesos de Tratamiento	3
1.5 Importancia de los Tratamientos Biológicos	4
1.6 Descripción del Problema	7
1.7 Objetivos	7
1.8 Estructura de la Tesis	8
2. ANÁLISIS Y DISEÑO DE REACTORES BIOLÓGICOS	10
2.1 Introducción	10
2.2 Reactores Biológicos	10
2.3 Características de las Células como Catalizadores	11
2.3.1 Metabolismo de los Microorganismos	11
2.3.2 Factores que Afectan el Crecimiento de los Microorganismos	14
2.4 Análisis de la Película Microbiana	14
2.5 Fenómenos de Transporte en Sistemas Microbianos	16

2.6 Tecnología del Reactor	18
2.6.1 Modelos Cinéticos para el Crecimiento de las Células	19
2.6.2 Modelos para Reactores Biológicos	23
2.7 Conclusiones	27
3. MODELO MATEMÁTICO	28
3.1 Introducción	28
3.2 Descripción del Sistema Físico	28
3.3 Suposiciones del Modelo Matemático	30
3.4 Desarrollo del Modelo Matemático	32
3.5 Variables Adimensionales	38
3.6 Modelo Matemático Adimensional	39
3.7 Métodos de Solución	42
3.8 Conclusiones	43
4. RESULTADOS Y ANÁLISIS	44
4.1 Introducción	44
4.2 Generalidades	44
4.3 Comportamiento del Modelo	45
4.3.1 El Estado Estacionario	45
4.4 Cambio en la Concentración de Alimentación de Sustrato	56
4.4.1 Validación del Modelo Matemático para Cambios en la Concentración de Alimentación de Sustrato	56
4.4.2 Flujo de Alimentación $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	61
4.4.3 Flujo de Alimentación $4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$	69
4.5 Cambio en el Flujo de Alimentación	76

4.5.1 Validación del Modelo Matemático para Cambios en el Flujo de Alimentación	76
4.6 Efecto de los Parámetros de Transferencia de Masa Interno (D_{ef}/λ)	78
4.7 Efecto del Coeficiente de Transferencia de Masa Global del Líquido	82
4.8 Efecto del Coeficiente de Transferencia de Masa Líquido-Sólido	85
4.9 Conclusiones	87
5. CONCLUSIONES	90
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	93
APÉNDICE A MÉTODOS NUMÉRICOS	96
A.1 Colocación Ortogonal en Elemento Finito	96
A.2 Métodos de Cuadratura	99
A.3 Método Implícito de Integración (Adams-Moulton)	101
A.3.1 Runge-Kutta	103
A.4 Aplicación de los Métodos Numéricos	103
APÉNDICE B DATOS EXPERIMENTALES	106
B.1 Parámetros	106
B.2 Dimensiones y Características del Reactor Experimental	111
B.3 Características Generales del Compuesto Xenobiótico	113

NOMENCLATURA

Variables

a_{vgl}	Área interfacial gas-líquido, $m^{-1}_{líquido}$
a_{vls}	Área interfacial líquido-sólido, $m^{-1}_{sólido}$
D_{ef,O_2}	Difusividad efectiva del oxígeno en la película, $m^2 s^{-1}$
$D_{ef,S}$	Difusividad efectiva del sustrato en la película, $m^2 s^{-1}$
F_g	Flujo volumétrico de alimentación del gas, $m^3_{gas} s^{-1}$
F_l	Flujo volumétrico de alimentación del líquido, $m^3_{líquido} s^{-1}$
H	Constante de Henry: Pa molar ⁻¹ (4.81×10^9 Pa fracc.molar ⁻¹)
k_d	Constante de muerte de los microorganismos, s^{-1}
k_g	Coefficiente de transferencia de masa local del gas, $m_{gas} s^{-1}$
K_L	Coefficiente de transferencia de masa global del líquido, $m_{líquido} s^{-1}$
k_L	Coefficiente de transferencia de masa local del líquido, $m_{líquido} s^{-1}$
k_{ls}	Coefficientes de transferencia de masa local líquido-sólido, $m_{sólido} s^{-1}$
K_{O_2}	Constante de Monod para el oxígeno, $kg_{O_2} m^{-3}_{reactor}$
K_S	Constante de Monod para el sustrato, $kg_S m^{-3}_{reactor}$
MM_{H_2O}	Masa molar del agua, $kgmol^{-1}$
O_{2eq}	Concentración de oxígeno del líquido en equilibrio con el gas, $kgm^{-3}_{líquido}$
O_{2g}	Concentración de oxígeno en la fase gaseosa, kgm^{-3}_{gas}
O_{2gint}	Concentración de oxígeno en la interfase gas-líquido, kgm^{-3}_{gas}
O_{2l}	Concentración de oxígeno en la fase líquida, $kgm^{-3}_{líquido}$
O_{2s}	Concentración de oxígeno en la película, $kgm^{-3}_{película}$
O_{2ref}	Concentración de adimensionalización de oxígeno kgm^{-3}
R	Constante universal de los gases, (8.3145 Jmol ⁻¹ K ⁻¹)
R_{O_2}	Tasa de consumo de oxígeno, s^{-1}
R_S	Tasa de consumo de sustrato, s^{-1}
R_X	Tasa de crecimiento de los microorganismos, s^{-1}
S_s	Concentración de sustrato en la película, $kgm^{-3}_{película}$
S_l	Concentración de sustrato en el líquido, $kgm^{-3}_{líquido}$
$S_{máx}$	Concentración de sustrato inhibitoria, $kgm^{-3}_{líquido}$
S_{ref}	Concentración de adimensionalización del sustrato kgm^{-3}
T	Temperatura, K
t	tiempo, s
V_T	Volumen total del reactor, m^3
X_s	Concentración de biomasa en la película, $kgm^{-3}_{película}$

X_{ref}	Concentración de adimensionalización de la biomasa kgm^{-3}
Y_{X/O_2}	Coefficiente estequiométrico, $\text{kg}_{\text{biomasa}} \text{kg}^{-1}_{\text{oxígeno}}$
$Y_{X/S}$	Coefficiente estequiométrico, $\text{kg}_{\text{biomasa}} \text{kg}^{-1}_{\text{sustrato}}$

Subíndices

E	Concentración de alimentación
0	Concentración inicial
sb	Concentración en la superficie de la película

Variables adimensionales

H^*	Constante de Henry definida por la ecuación (3.7)
O_2^*	Concentración promedio de oxígeno en la película
O_{2g}^*	Concentración de oxígeno en la fase gas
O_{2l}^*	Concentración de oxígeno en la fase líquida
O_{2s}^*	Concentración de oxígeno en la fase sólida
S^*	Concentración promedio de sustrato en la película
S_l^*	Concentración de sustrato en la fase líquida
S_s^*	Concentración de sustrato en la fase sólida
$S_{máx}^*$	Concentración de sustrato inhibitoria
t^*	Tiempo
X^*	Concentración promedio de microorganismos en la película
X_s^*	Concentración de microorganismos en la película

Letras griegas

ζ	Espesor de la película microbiana adimensional
ξ	Coordenada espacial
λ	Espesor de la película, m
ϵ_g	Fracción del gas presente en el reactor, $\text{m}^3_{\text{gas}} \text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$
ϵ_s	Fracción del sólido presente en el reactor, $\text{m}^3_{\text{sólido}} \text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$
ϵ_l	Fracción del líquido presente en el reactor, $\text{m}^3_{\text{líquido}} \text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$
$\mu_{máx}$	Tasa de crecimiento máximo de los microorganismos, s^{-1}
ρ_{H_2O}	Densidad del agua, kgm^{-3}

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Generalidades

En los últimos años ha aumentado la conciencia de los problemas ambientales estimulando la atención entre la relación que existe entre el desarrollo económico y su impacto con el medio ambiente. La industria es primordial para la economía de una sociedad y es una maquinaria indispensable para su crecimiento. Una de las grandes paradojas de la tecnología es que contribuye primordialmente al progreso humano, a la modernización y al bienestar pero a la vez causa la degradación del medio ambiente actuando en contra del hombre, tal es el caso de la contaminación del agua.

La economía y el medio ambiente son dos fenómenos que se contraponen; un crecimiento económico está acompañado por lo regular del deterioro del ambiente si no existen reglamentaciones ecológicas que lo protejan, causado principalmente por la producción y el consumo de materias primas así como de los desechos generados por la sociedad provenientes de sus actividades cotidianas. El desarrollo de la sociedad debe estar directamente ligado a la protección del medio ambiente (Viessman y Hammer, 1993).

Una de las ventajas de los procesos biotecnológicos en cuanto al deterioro del medio ambiente es el uso de métodos para el tratamiento de aguas residuales. Para eliminar contaminantes provenientes de las actividades humanas, se han desarrollado nuevos procesos que permiten reducir la toxicidad de todas estas sustancias que por lo general están mezcladas con otros constituyentes.

Los reactores biológicos son una parte importante en estos procesos, su uso se ha incrementado como una alternativa viable para degradar contaminantes orgánicos (fenoles, hidrocarburos aromáticos policíclicos, alifáticos halogenados, etc.), ya que son capaces de eliminar hasta en un 99% las sustancias tóxicas presentes en aguas residuales. Además de que tienen ventajas económicas y de implementación sobre los procesos físicos y químicos (Viessman y Hammer, 1993).

1.2 Contaminación del Agua

Uno de los mayores problemas que enfrenta la sociedad es la contaminación del agua, aunque ésta se localiza en todas las regiones de la Tierra, el inconveniente es que su distribución, calidad y cantidad son altamente variables de un lugar a otro. Las fuentes más voluminosas de agua son los océanos; se estima que contienen 1,310,000 km³ de agua, mientras que las fuentes suministradoras de agua más valiosas son la atmósfera, la superficie de la Tierra, el subsuelo y los casquetes polares, pero este suministro sólo es del 3% de lo contenido en los océanos (Viessman y Hammer, 1993).

Es por eso que la escasez del agua, las limitantes ambientales, las reglamentaciones ecológicas, y la economía son los principales factores que han causado que la industria incremente la recirculación y el tratamiento de sus aguas residuales.

De forma general, los contaminantes del agua pueden ser clasificados de acuerdo a su estado (sólido, líquido o gaseoso); por la forma en que se encuentran (disueltos, suspendidos, agregados ó formando coloides) y por su naturaleza (orgánica ó inorgánica), (Quintero, 1993).

A su vez, numerosos compuestos químicos orgánicos y diversos iones inorgánicos son clasificados como contaminantes tóxicos. Los contaminantes tóxicos pueden ser clasificados en diez grupos: alifáticos halogenados, fenoles, aromáticos monocíclicos (excluyendo a los fenoles y ftalatos), nitrosaminas, ésteres de ftalatos, hidrocarburos aromáticos policíclicos, pesticidas, hidrocarburos clorados, bifenilos policlorados y metales pesados (Viessman y Hammer, 1993).

1.3 Volumen y Calidad de Flujos Residuales

La determinación de la cantidad y calidad de desechos presentes en el agua permite desarrollar estrategias en los tratamientos de agua residual.

Las principales fuentes productoras de aguas residuales son las ciudades, las industrias y las actividades agrícolas. Por lo general, estos desechos se tratan independientemente; sin embargo, hay algunos desechos industriales que son transportados y tratados en sistemas municipales. El volumen del agua residual es altamente variable en cantidad y calidad dependiendo principalmente del producto producido y del tamaño de la industria. Los desechos generados por las industrias pueden incluir metales tóxicos, compuestos químicos, materiales orgánicos, contaminantes biológicos y materiales radiactivos (Viessman y Hammer, 1993).

1.4 Selección de Procesos de Tratamiento

Una industria tiene dos posibilidades para el tratamiento del agua residual generada: 1) el agua puede ser tratada por separado en una planta de tratamiento industrial de residuos antes de ser descargada al drenaje; 2) los residuos industriales pueden ser pretratados en un sitio del proceso industrial antes de ser descargados a la planta municipal.

El pretratamiento de aguas residuales en sitios industriales es frecuentemente parte del diseño de la planta. Los cambios en los procesos, modificaciones al equipo, recuperación de subproductos, y la reutilización de aguas residuales pueden tener una ventaja económica. Ciertos residuos industriales pueden ser pretratados para reducir compuestos orgánicos e inorgánicos antes de que el agua sea descargada a la planta municipal (Viessman y Hammer, 1993).

El principal objetivo en el tratamiento de aguas residuales es reducir la descarga de tóxicos a niveles mínimos. La evaluación de la reducción de la toxicidad en una planta de tratamiento es el primer paso. Su propósito es proveer agua que sea química y microbiológicamente segura ya sea para el consumo humano (agua potable), o bien

que tenga una adecuada calidad para uso industrial (agua industrial), (Viessman y Hammer, 1993).

Existen tres procesos importantes en el tratamiento de aguas residuales y son usados dependiendo de la industria y el tipo de contaminante presente en el agua. Estos procesos son: físicos, químicos y biológicos.

Los procesos de tratamientos físicos son métodos de separación y limpieza mecánica. Los métodos usados son la sedimentación y la filtración (Quintero, 1993). El propósito principal de los tratamientos químicos es aglomerar materia específica y coloides en floculos que pueden ser separados del agua por sedimentación y filtración (Viessman y Hammer, 1993). Los sistemas de tratamiento biológico consisten en una mezcla de microorganismos que oxidan la materia orgánica disuelta, removiéndola de la solución, transformándola en nueva biomasa y en algunos casos en CO_2 y H_2O . La oxidación biológica puede ser realizada en condiciones aerobias y en algunos casos anaerobias. Existen tres métodos para efectuar la oxidación biológica: 1) lagunas de oxidación, estabilización o aireación; 2) filtros biológicos o reactores de escurrimiento; y 3) lodos activados (Quintero, 1993).

1.5 Importancia de los Tratamientos Biológicos

Entre los diferentes tipos de reactores biológicos que se utilizan para el tratamiento de afluentes están los reactores de células suspendidas y los de células inmovilizadas (película fija). En determinados casos se prefiere el uso de reactores de película fija a los de células suspendidas ya que se obtienen altas concentraciones de masa celular y debido a que la resistencia a la transferencia de masa desde el seno de la solución a la película microbiana es importante lo que implica que la difusión de materiales inhibitorios se vea reducida (Skowlund y Kirmse, 1989). Los sistemas de película fija se usan para procesos en los que la degradación es muy lenta debido a los problemas de difusión en la película.

El sistema de película fija es más estable que el sistema de células suspendidas, ya que al estar inmovilizadas las células no hay problema de lavado del reactor. El

lavado del reactor consiste en el hecho de que en éste no existen células como consecuencia de las características hidráulicas del reactor; es decir, la tasa de dilución es más grande que la tasa de crecimiento de los microorganismos (Bailey y Ollis, 1986).

En un reactor de película fija los microorganismos son soportados en un material poroso; sin embargo, también pueden existir células libres como producto del esfuerzo cortante debido a la hidrodinámica del sistema. La importancia de las células libres en un reactor de película fija se debe a que pueden degradar los compuestos xenobióticos con mayor facilidad que las células inmovilizadas debido a que la resistencia a la transferencia de masa externa se reduce porque existe un mayor contacto entre el líquido y las células.

Sin embargo, la contribución de las células libres en la degradación del afluente es pequeña si el reactor opera con una tasa de dilución más alta que la tasa de crecimiento de los microorganismos, provocando que el reactor se "lave", es decir, las células libres abandonan el reactor como consecuencia de la hidrodinámica del sistema, llegando eventualmente a desaparecer. Si el reactor opera con una tasa de dilución menor o igual a la tasa de crecimiento de los microorganismos, las células libres permanecen contribuyendo a una mayor degradación de sustrato, aumentando la eficiencia global del reactor de película fija.

Por otra parte, la mayoría de los compuestos xenobióticos son tóxicos a niveles de concentración altos por lo que las células libres son más propensas a sufrir inhibición ante pequeñas variaciones en la concentración del sustrato.

Evidencias experimentales (Chávez-Rivera, 1994) comprueban que la cantidad de células libres en un reactor de película fija no influye fuertemente en la degradación del sustrato, ya que el porcentaje de masa de células libres es de 0.5% con respecto a la masa de células inmovilizadas para un tiempo de residencia de cinco horas. Además estas células libres no se sabe si están vivas o muertas.

Entre los reactores de película fija se encuentran los reactores de escurrimiento y los reactores contactores rotatorios. Los reactores de escurrimiento consisten en lechos de piedras o de algún otro material ya sea poroso o de plástico, sobre los cuales crece

una película de microorganismos que se adhiere al soporte. Al filtro se le añade en forma continua o intermitente el agua residual; el líquido escurre entre los intersticios y es consumido por la película de microorganismos. Un reactor biológico contactor rotatorio consiste en una serie de discos de empaque de plástico de gran diámetro que giran lentamente en tanques que contienen al agua residual (Quintero, 1993).

Los reactores de película fija ofrecen una buena opción para la biodegradación de materiales orgánicos principalmente xenobióticos; es decir, aquellos compuestos que han sido sintetizados químicamente y que no se encuentran en forma natural en el medio ambiente, por lo que frecuentemente su degradación resulta difícil. Existen trabajos que confirman la utilidad de los reactores de película fija para la degradación de compuestos como naftalen-2-sulfonato (Wagner y Hempel, 1988), fenol (Worden y Donaldson, 1987; Livingston y Chase, 1989; Fan *et al.*, 1990), y 3-4 dicloroanilina (Chávez-Rivera, 1994; Livingston, 1991).

Se han diseñado nuevos reactores que ofrecen ventajas económicas, técnicas y hasta biológicas sobre los reactores convencionales (generalmente de células suspendidas) en los procesos de producción de biomasa (antibióticos, enzimas, esteroides), o en los procesos de tratamiento de aguas residuales. Entre este tipo de reactores se encuentran los reactores "air-lift", en donde el gas es dispersado dentro del líquido por medio de un aspersor. El reactor "air-lift" es de tres fases (fase sólida: microorganismos, fase líquida: afluente, y fase gaseosa: aire), considerándose eficiente por el contacto entre las diferentes fases que intervienen en el proceso ya que disminuye los problemas de transferencia de masa. Experimentalmente se ha observado que en todos los reactores aerobios un parámetro de diseño importante y determinante es la estimación del coeficiente de transferencia del oxígeno de la fase gas a la superficie de los microorganismos, especialmente cuando hay grandes densidades microbianas y cuando el crecimiento de los microorganismos está limitado a la disponibilidad de oxígeno en la fase líquida (Characklis, 1983; Moo-Young y Blanch, 1981; Moo-Young y Kargi, 1985; Worden y Donaldson, 1987; Livingston y Chase, 1989; Livingston, 1991; Wagner y Hempel, 1988).

1.6 Descripción del Problema

Existen varias limitantes en la operación de los reactores biológicos (aerobios) usados para el tratamiento de afluentes tóxicos, como son: que el volumen y la calidad de las corrientes no sean constantes; que la transferencia de oxígeno de la fase gas a la superficie de los microorganismos se dificulte cuando hay grandes densidades microbianas; y la disponibilidad del sustrato orgánico en la fase líquida cuando el crecimiento de los microorganismos está limitado e inhibido por éste.

Una forma de entender tales problemas es el desarrollo de modelos matemáticos, es por esto que en este trabajo se propone un modelo que permita simular el comportamiento dinámico y analizar los efectos en las tres fases que conforman un reactor biológico tipo "air-lift" de película microbiana inmovilizada, ante cambios en la alimentación del sustrato orgánico ya sea en calidad como en volumen.

El modelo propuesto involucra a las tres fases del reactor, ya que en la mayoría de los trabajos realizados en este campo de investigación los modelos son en dos fases, la fase líquida y la fase sólida, no tomando en cuenta la fase gaseosa la cual es importante por los parámetros de transferencia de masa que involucra el sistema (Skowlund, 1990; Wagner y Hempel, 1988; Livingston y Chase, 1989; Livingston, 1991; Wanner, 1986 y 1995).

Es importante señalar que en el presente trabajo se simula la respuesta de los microorganismos ante un cambio en la concentración del sustrato, analizando su comportamiento en los diferentes puntos de la película.

1.7 Objetivos

1. Desarrollar un modelo matemático para un reactor biológico de película inmovilizada que degrada una corriente fluida, involucrando las tres fases antes descritas.
2. Implementar la solución numérica del modelo matemático.

2.1 Describir la respuesta de las especies en las diferentes fases del reactor biológico aerobio bajo cambios bruscos en la concentración y flujo de alimentación del sustrato orgánico limitante, tomando en cuenta la transferencia de masa para el oxígeno en la fase gas y en la fase líquida, así como la difusión y la reacción bioquímica del sustrato y oxígeno, limitando el crecimiento de los microorganismos en la película.

2.2 Simular los perfiles en la película en relación con los resultados experimentales obtenidos por Chávez-Rivera (1994), por medio de las variaciones en las concentraciones del sustrato en la alimentación.

3. Validar la respuesta dinámica del sistema con resultados experimentales. Realizar un análisis de parámetros importantes en el planteamiento del modelo.

La importancia del modelo presentado en este trabajo es que describe las tres fases del reactor, realizando una descripción de la concentración de oxígeno, sustrato y microorganismos en diferentes puntos del espesor de la película microbiana. Para describir los fenómenos de transporte de masa por difusión y la reacción en la película, se utilizó el método de colocación ortogonal en elemento finito; el método de colocación ortogonal ofrece ventajas al disminuir el error de truncamiento al discretizar las ecuaciones diferenciales parciales en ordinarias, y el de diferencias finitas la localización de puntos donde es necesario conocer la solución.

1.8 Estructura de la Tesis

La presente tesis consta de cinco capítulos y dos apéndices. Cada capítulo contiene una introducción así como una conclusión. En el capítulo 2 se hace referencia a conceptos teóricos desarrollados por diversos investigadores, se analiza a la biomasa, y los diferentes fenómenos que hacen posible que se desarrolle ésta; los problemas de transferencia de masa y difusión que existen en los reactores, así como los diferentes modelos que analizan al reactor biológico como un todo. En el capítulo 3 se desarrolla el modelo matemático, fundamentándolo en algunas hipótesis utilizadas por algunos autores así como las requeridas para su desarrollo. En el capítulo 4 se presentan los

resultados de las simulaciones realizadas, así como su validación con los resultados experimentales de Chávez-Rivera (1994). Finalmente en el capítulo 5 se realiza una conclusión general del trabajo y sugerencias acerca de un trabajo futuro. El apéndice A trata de los métodos numéricos utilizados para la solución del modelo. En el apéndice B se presentan los parámetros utilizados para las simulaciones así como una descripción general del reactor experimental a partir del cual se tomó la información de los parámetros.

CAPÍTULO 2

ANÁLISIS Y DISEÑO DE REACTORES BIOLÓGICOS

2.1 Introducción

Los reactores biológicos ocupan un lugar importante en los procesos biotecnológicos, su diseño está dominado frecuentemente por el desarrollo económico y tecnológico del proceso, su uso se ha incrementado como una alternativa viable para el tratamiento de aguas residuales.

Los reactores son la parte fundamental de los tratamientos biológicos, en este caso el reactor es usado para transformar un material de desecho mediante una reacción bioquímica efectuada por células (biomasa) que pueden estar suspendidas o inmóviles dentro de éste.

En este capítulo se presentan las características de los reactores biológicos, lo que implica a su vez el análisis y cinética de los microorganismos. También se presentan los diferentes fenómenos de transporte que suceden en el reactor, así como los distintos modelos que se han propuesto para entender su comportamiento.

2.2 Reactores Biológicos

Para un diseño y control óptimo de los reactores biológicos se hace uso de la tecnología y conceptos desarrollados en el campo de la ingeniería de reactores químicos, especialmente en los aspectos de mezclado, fenómenos de calor y de masa, y en la metodología de modelación y control.

Los reactores biológicos presentan numerosos problemas como la longevidad de las células y la esterilidad del medio. Existen también problemas de estabilidad en procesos continuos, los cuales se pueden presentar cuando existen bajos niveles de sustrato limitante y altos niveles de metabolitos inhibitorios (Engasser, 1988).

Los microorganismos se clasifican en organismos pluricelulares y unicelulares; los unicelulares se subdividen en protistas. Los organismos protistas se pueden clasificar como: procariotas y eucariotas; las primeras se subdividen en bacterias y algas azul-verdosas. Las eucariotas se subdividen en algas, protozoarios y hongos; los hongos a su vez se subdividen en levaduras y mohos. Todas ellas tienen en común el ser entidades vivientes, con posibilidades de crecer, reproducirse y extraer energía del ambiente, desarrollar síntesis química, así como de realizar transporte activo. Las similitudes existen también en sus rutas metabólicas y en los mecanismos de control intracelulares, ambos a nivel genético.

Su explotación industrial cubre las áreas de producción de alimentos, farmacéuticos, químicos y el tratamiento de desechos. Las bacterias son microorganismos fundamentales en la estabilización de residuos orgánicos y de importancia básica en el tratamiento biológico de aguas residuales (Engasser, 1988).

2.3 Características de las Células como Catalizadores

El diseño y operación de un reactor tienen que ser adaptados a la naturaleza biológica de las células. Cada célula individual puede ser considerada como un micro-reactor en el cual existen miles de reacciones químicas que ocurren simultáneamente, sujetas a un complejo control interno. A través de las rutas internas metabólicas, la célula extrae nutrientes de su ambiente, y los transforma mediante síntesis de biomoléculas en metabolitos (Engasser, 1988).

2.3.1 Metabolismo de los Microorganismos

Basados en sus requerimientos nutritivos, los microorganismos se clasifican en heterótrofos y autótrofos. Los microorganismos autótrofos usan bióxido de carbono como fuente de carbono oxidando compuestos inorgánicos para obtener energía y así

producir más microorganismos. Estos microorganismos se usan principalmente en la ingeniería sanitaria. Los heterótrofos usan compuestos orgánicos como fuente de energía y carbono para realizar la síntesis de biomoléculas (Bailey y Ollis, 1986).

Los microorganismos ya sean autótrofos o heterótrofos, realizan una serie de reacciones bioquímicas de oxidación-reducción para síntesis, transporte y respiración y así cubrir sus requerimientos de energía. Este proceso bioquímico (oxidación-reducción) se llama metabolismo e implica al catabolismo y al anabolismo, es decir, reacciones de degradación y asimilación. Si los microorganismos requieren oxígeno libre disuelto como aceptor final de electrones para vivir y multiplicarse se les llama aerobios; anaerobios si usan otro oxidante diferente al oxígeno, y los facultativos que son una clase de microorganismos que usan el oxígeno disponible pero que pueden vivir y reproducirse en ausencia de éste (Bailey y Ollis, 1986).

En el metabolismo heterótrofo, la materia orgánica es el sustrato (nutriente) usado como fuente de energía. Sin embargo, la mayor parte de la materia orgánica en el agua residual está en forma de moléculas grandes que no pueden penetrar la membrana celular de los microorganismos. El microorganismo para metabolizar moléculas de alto peso molecular debe ser capaz de hidrolizarlas en fracciones y así poder assimilarlas. La primera reacción bioquímica es la hidrólisis de carbohidratos complejos en unidades solubles de azúcar, proteínas en aminoácidos, y grasas insolubles en ácidos grasos. Bajo condiciones aerobias, los compuestos orgánicos solubles son oxidados a productos finales como CO_2 y agua. Bajo condiciones anaerobias la materia orgánica es descompuesta en alcoholes, ácidos orgánicos, además de CO_2 y agua (Viessman y Hammer, 1993).

La respiración es un proceso de liberación de energía, en el cual los compuestos orgánicos y los inorgánicos reducidos son oxidados a compuestos inorgánicos. Para realizar la respiración, los microorganismos usan diferentes reductores y oxidantes, si un oxidante distinto al oxígeno es involucrado se trata de una respiración anaerobia, la respiración será aerobia si el oxidante es el oxígeno. Es conveniente descomponer la respiración en dos fases. En la primera, los compuestos orgánicos son oxidados a CO_2 , y pares de átomos de hidrógeno (electrones) son transferidos al NAD (nicotinamida

adenosina dinucleotido). En la segunda fase, los átomos de hidrógeno son transferidos a través de una secuencia de reacciones conocida como “cadena respiratoria”, durante las cuales el ATP (trifosfato de adenosina) es regenerado a partir del ADP (difosfato de adenosina). Al final, los átomos de hidrógeno se combinan con el oxígeno para formar moléculas de agua. Todas estas reacciones liberan energía, lo cual es consecuencia del calor de reacción involucrado en la cadena respiratoria (Bailey y Ollis, 1986).

Las tres formas de transporte a través de la membrana de la célula son: difusión pasiva, difusión facilitada y transporte activo.

La síntesis (anabolismo) es el proceso bioquímico en el que se utiliza el sustrato para el crecimiento y reproducción de nuevo protoplasma, es decir, los microorganismos procesan materia orgánica para crear nuevas células.

Las cuatro clases de compuestos poliméricos celulares son las grasas, los lípidos, los ácidos poliribonucleicos (DNA, RNA), y las proteínas. Los átomos de carbono, nitrógeno, y oxígeno son rearrreglados en los procesos metabólicos de las células, las cantidades totales de cada uno de estos elementos incorporados en las células es igual a las cantidades que son removidas del medio, es por esto que es importante conocer la composición de la masa celular. Los elementos más importantes de las células son carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y fósforo; en base seca el protoplasma contiene de 10 a 12% de nitrógeno y aproximadamente 2.5% de fósforo, lo demás es carbono, oxígeno e hidrógeno. Algunas fórmulas empíricas de algunos microorganismos se expresan como: $CH_{1.66}N_{0.20}O_{0.27}$, $CH_2N_{0.25}O_{0.5}$ para bacterias; $CH_{1.64}N_{0.16}O_{0.52}P_{0.01}S_{0.005}$, $CH_{1.75}N_{0.15}O_{0.5}$ para levaduras; se observa que algunas variaciones en la composición celular son evidentes de unas especies a otras (Bailey y Ollis, 1986).

Las relaciones entre el metabolismo (catabolismo), la energía, y la síntesis (anabolismo) son importantes para entender los sistemas de tratamiento biológico. El metabolismo transforma la materia orgánica en energía y la energía es utilizada en la síntesis. Estos dos procesos están acoplados, y en algunos casos un máximo de remoción de materia orgánica por una población dada de microorganismos ocurre durante su máximo crecimiento y viceversa (Bailey y Ollis, 1986).

2.3.2 Factores que Afectan el Crecimiento de los Microorganismos

La heterogeneidad del crecimiento poblacional de las células es importante, diferentes células en un reactor pueden variar su actividad química. El diseño y optimización de un reactor dependen de la sensibilidad de las células al ambiente físico y químico. Los factores más importantes que afectan el crecimiento de los microorganismos son: temperatura, pH, disponibilidad de nutrientes y oxígeno, presencia de toxinas y tipos de sustrato (Bailey y Ollis, 1986).

2.4 Análisis de la Película Microbiana

Los investigadores que han descrito el comportamiento de la película microbiana se han encontrado con diversos problemas, ya que es difícil saber con precisión como está formada. Una definición aceptada es la de una capa de microorganismos que se desarrolla sobre una superficie sólida y regularmente es idealizada como una red homogénea de bacterias y polímeros extracelulares que ligan a las bacterias entre sí y a la superficie (Sáez y Rittmann, 1988; Characklis, 1983). En las últimas investigaciones experimentales se ha observado que las películas aerobias consisten en aglomeraciones de células y de polímeros, separadas por espacios intersticiales, las aglomeraciones llegan a medir 300 μ m y los espacios 100 μ m de ancho (de Beer y Stoodley, 1995).

Mecanísticamente, el desarrollo de la película de microorganismos (Figura 2.1) puede describirse como el resultado de los siguientes procesos (Characklis, 1983):

1.- Transporte de los microorganismos desde el seno del fluido hasta la superficie mojada del soporte. Adhesión a la superficie del soporte. Una superficie está expuesta a un fluido que contiene microorganismos dispersos, nutrientes y macromoléculas orgánicas. Dependiendo del régimen de flujo, de las propiedades adhesivas y físicas de los microorganismos, se permite la formación de una monocapa orgánica en la superficie del soporte.

2.- Metabolismo microbiano dentro de la película. Este proceso involucra el crecimiento, mantenimiento, y formación de productos metabólicos llevada a cabo por los microorganismos en presencia de suficientes nutrientes (sustrato orgánico).

3.- *Esfuerzo cortante del fluido en la superficie de la película.* Conforme la película aumenta de grosor, el esfuerzo cortante del fluido entre la interfase de la película generalmente se incrementa. Al aumentar el grosor de la película, el gradiente de concentración del sustrato, oxígeno, o limitación de nutrientes aumenta en las partes más internas de la película, debilitándola y causando su desprendimiento.

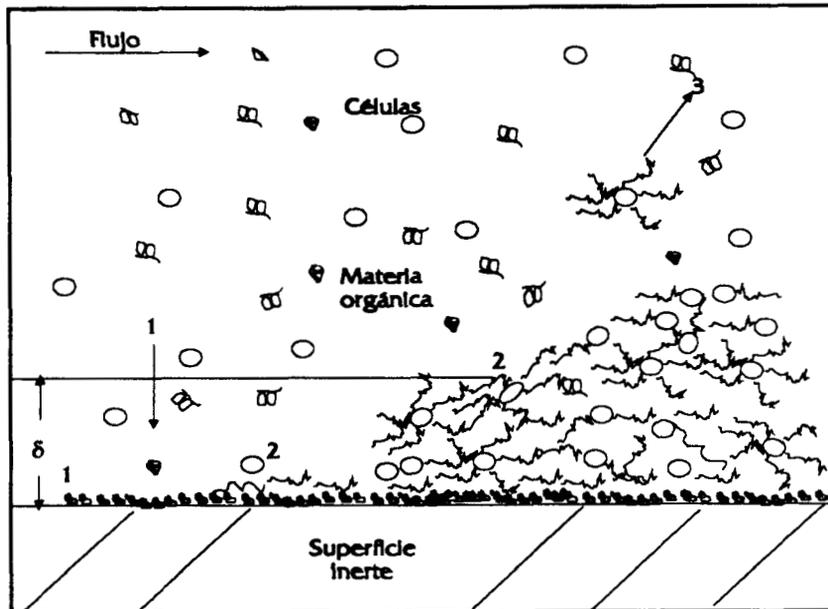


Fig. 2.1 Diagrama del desarrollo de la película de microorganismos.

1.- Adsorción de la materia orgánica y transporte de las partículas.

2.- Adhesión y crecimiento. 3.- Desprendimiento.

Las propiedades físicas, químicas y biológicas de la película son dependientes del ambiente al cual la superficie de desarrollo está expuesta. El microambiente físico y químico se combinan para seleccionar a los microorganismos prevalentes, los cuales modificarán la superficie del microambiente.

Las propiedades físicas más importantes de la película microbiana son el volumen (espesor) y la masa. Un grosor activo de película varía de 70-100 μm en sistemas de flujo turbulento (Skowlund y Kimse, 1989), o de 200-400 μm para flujos turbulentos a contracorriente (Freitas dos Santos y Livingston, 1995). Las propiedades de transporte son importantes al cuantificar efectos sobre la transferencia de masa, calor y momento. Los coeficientes de transporte están generalmente relacionados con las propiedades físicas de la película, por ejemplo: al aumentar la densidad de la película el coeficiente de difusión disminuye, la densidad está definida como la masa seca de

microorganismos por unidad de volumen de la película mojada (Characklis, 1983). El coeficiente de difusión puede variar de 2 al 98% con respecto a su valor en agua (Fan *et al.*, 1990). La conductividad térmica de la película no es muy diferente a la del agua (Characklis, 1983).

Las propiedades químicas son indeterminadas ya que la composición inorgánica de las películas varía indefinidamente con la composición química del seno del líquido. Compuestos como el calcio, magnesio, y fierro afectan los puentes intermoleculares de los polímeros de la película. La composición orgánica está relacionada fuertemente con la energía y las fuentes de carbono disponibles para el metabolismo.

En cuanto a las propiedades biológicas, los organismos que se adhieren a una superficie influenciarán fuertemente la tasa de desarrollo de la película y sus propiedades físicas y químicas (Characklis, 1983).

2.5 Fenómenos de Transporte en Sistemas Microbianos

Se tienen diferentes resistencias en los procesos biológicos, principalmente en los sistemas aerobios (Bailey y Ollis, 1986). Los fenómenos que suceden en el reactor pueden clasificarse de la siguiente forma:

a) Difusión del gas a la interfase gas-líquido. La transferencia de oxígeno de la fase gas a la interfase líquida tiene un papel importante en los procesos biológicos aerobios. El oxígeno es un factor determinante en la productividad del reactor especialmente para células en las que la demanda de oxígeno es elevada, y las concentraciones celulares o las viscosidades del líquido en el reactor son altas (Bailey y Ollis, 1986).

b) Transporte a través de la interfase gas-líquido. Se han hecho esfuerzos técnicos para mejorar el mezclado del líquido en el reactor para eliminar las limitaciones de oxígeno en fermentaciones industriales y se han realizado nuevos diseños de reactores con novedosos sistemas de aireación. Sin embargo, el problema de la limitación en la tasa de transferencia de oxígeno aun persiste y es necesario un control continuo de la concentración de oxígeno disuelto en el medio (Bailey y Ollis, 1986).

c) *Difusión del sustrato a través de la región del líquido sin mezclar adyacente a la burbuja dentro del líquido perfectamente mezclado.* Esta resistencia depende de las condiciones hidrodinámicas del sistema, el movimiento convectivo del líquido permite que la difusión del sustrato a partir de esa región se facilite para disolverse en el líquido perfectamente mezclado (Moo-Young y Blanch, 1981).

d) *Transporte del sustrato a través del seno del líquido a una región relativamente sin mezclar que rodea a los microorganismos.* Esta resistencia también es dependiente de la hidrodinámica del sistema. En flujos de régimen turbulento, la escala de circulación es importante dado que su magnitud determina el grosor de la región a la cual el fluido se renueva con líquido fresco. Por último, la tasa de transferencia de masa es dependiente de la difusividad local y de la tasa a la cual el líquido de la superficie es renovado por el patrón de circulación (Bailey y Ollis, 1986; Moo-Young y Blanch, 1981).

e) *Transporte a través de la región líquida que rodea a los microorganismos.* Esta resistencia se puede reducir por el rompimiento de las aglomeraciones de células y generación de una sola bacteria por la acción del estrés mecánico. Los coeficientes de transferencia de masa líquido-sólido son importantes y esta resistencia no se debe despreciar sin antes realizar un análisis de la magnitud de los parámetros (Livingston y Chase, 1989).

f) *Transporte difusivo hacia el interior de la película.* En esta etapa el oxígeno y el sustrato orgánico se difunden a través de la película de microorganismos. La difusión está gobernada por la cinética de los microorganismos, densidad de la película y por las propiedades físico-químicas de la película. La difusión del sustrato y del oxígeno se dificulta al aumentar la densidad de la película (Fan *et al.*, 1990).

Investigaciones de de Beer y Stoodley (1995), demuestran que si hay flujos de alta velocidad, el líquido proveniente de la solución puede fluir en los espacios intersticiales de la película, esto permite que la difusión y la convección contribuyan a la transferencia de masa. Pero si los flujos son bajos, entonces el líquido se estanca en los espacios intersticiales de la película, y el líquido sólo se transfiere por difusión.

g) Consumo del sustrato por reacción bioquímica dentro del organismo. Una vez que los constituyentes requeridos han alcanzado la célula, ésta realiza las reacciones de metabolismo necesarias produciendo metabolitos. El régimen hidráulico del sistema tiene gran influencia en la cinética. La velocidad del fluido en el reactor afecta la tasa de remoción orgánica disminuyendo el grosor de la película del líquido y por consecuencia la resistencia a la transferencia externa de masa.

Dentro de la película existe una disminución gradual en la concentración de microorganismos debido a la tasa de conversión del sustrato hacia el soporte, esto se observa en los perfiles de concentración del sustrato si seccionamos la película de microorganismos en diversos puntos a lo ancho de la misma (Bailey y Ollis, 1986; Characklis, 1983).

h) Difusión del producto. Los productos generados de la degradación de afluentes tóxicos son pequeñas moléculas, las cuales se difunden fácilmente a través de la película al seno del líquido. Además algunos de estos productos pueden ser usados por otras bacterias para sus procesos metabólicos (Bailey y Ollis, 1986).

2.6 Tecnología del Reactor

El diseño de reactores biológicos debe tomar en cuenta las propiedades de las células y promover de la mejor forma posible las interacciones entre las células y el medio. En un ambiente perfectamente cerrado se debe proveer un eficiente mecanismo de mezclado que facilite la transferencia de masa y calor (generado por las reacciones de metabolismo), entre las diferentes fases que lo conforman (Bailey y Ollis, 1986).

Los modelos son herramientas esenciales para la optimización y extrapolación a reactores industriales; la modelación de reactores con células cubre un rango muy amplio de condiciones de operación. Los numerosos estudios en la descripción matemática de los reactores puede ser clasificada en dos grandes grupos: la modelación de la cinética microbiana y la de los reactores biológicos (Engasser, 1988).

2.6.1 Modelos Cinéticos para el Crecimiento de las Células

Los modelos cinéticos deben tomar en cuenta el crecimiento de las células, el consumo de nutrientes, la producción de los principales metabolitos y la composición del medio.

Para organismos unicelulares que se dividen y reproducen, el incremento en la biomasa está acompañado de un aumento en el número de células presente. Asociado con el crecimiento de las células está el proceso de tomar alimento del medio y de producir metabolitos. Las tasas de estos procesos dependen de la edad y del estado fisiológico de las células (Engasser, 1988).

Las clases de modelos utilizados para describir el crecimiento de los microorganismos pueden clasificarse como (Bailey y Ollis, 1986; Characklis, 1983):

- Estructurados, son representaciones celulares multicomponentes, es decir, separan a los microorganismos en más de una variable de estado. Modelan los cambios internos de la estructura de las células o la estructura de las poblaciones mixtas de microorganismos.
- No-estructurados, son representaciones celulares de un solo componente, estos modelos suponen que la biomasa está caracterizada por una sola variable de estado. No toman en cuenta la estructura interna. El modelo de Monod que se describirá en seguida, es no-estructurado, ya que la concentración del sustrato limitante es el parámetro que describe a la biomasa.
- Estocásticos, son usados cuando existen desviaciones en el crecimiento de las células, es decir, cuando su crecimiento es azaroso, entonces el número de células se considera como una variable del modelo. Son útiles cuando existen diferencias en los organismos.
- Determinísticos, en estos modelos las variables de salida tienen valores que son completamente determinados por la estructura del sistema. Se aplica a casos cuando un gran número de organismos está involucrado, (mayor de 10,000).

- Segregados, cuando se hacen consideraciones discretas de la heterogeneidad de las células. Se usan parámetros discretos, como el número de células para describir a la biomasa.
- No-segregados, cuando se considera un promedio de las propiedades de la célula. Consideran que la biomasa está homogéneamente dispersa a través del fluido del reactor.

En la mayoría de los trabajos de simulación de reactores biológicos se utilizan modelos no-estructurados, en los cuales sólo concentración celular es empleada para caracterizar la biofase (Chávez-Rivera, 1994; Livingston, 1991; Wagner y Hempel, 1988).

La tasa neta de crecimiento r_x , se puede escribir como μX , donde X es la masa celular por volumen de cultivo y μ es el recíproco del tiempo, es decir, la tasa de crecimiento específico de las células. Es práctico conocer cual es la concentración del sustrato limitante para el cual se tiene una curva de crecimiento hiperbólico.

Una relación funcional fue propuesta por Monod en 1942, la cual establece:

$$\mu = \frac{\mu_{m\acute{a}x} S}{K_s + S} \quad (2.1)$$

Donde S es la concentración del sustrato limitante; $\mu_{m\acute{a}x}$ es la tasa máxima de crecimiento alcanzada cuando $S \gg K_s$ y la concentración de los demás nutrientes esenciales permanece sin cambio, y K_s es el valor de la concentración del nutriente limitante a la cual la tasa de crecimiento llega a la mitad de su máximo valor.

La ecuación de Monod es una gran simplificación de todos los procesos biomoleculares, pero que expresa razonablemente las interrelaciones de los parámetros del modelo. Uno de los significados más importantes de la ecuación de Monod es que la tasa de crecimiento de los microorganismos está limitada por el sustrato orgánico. La Figura 2.2 muestra gráficamente el significado físico de las constantes del modelo de Monod (Levenspiel, 1993).

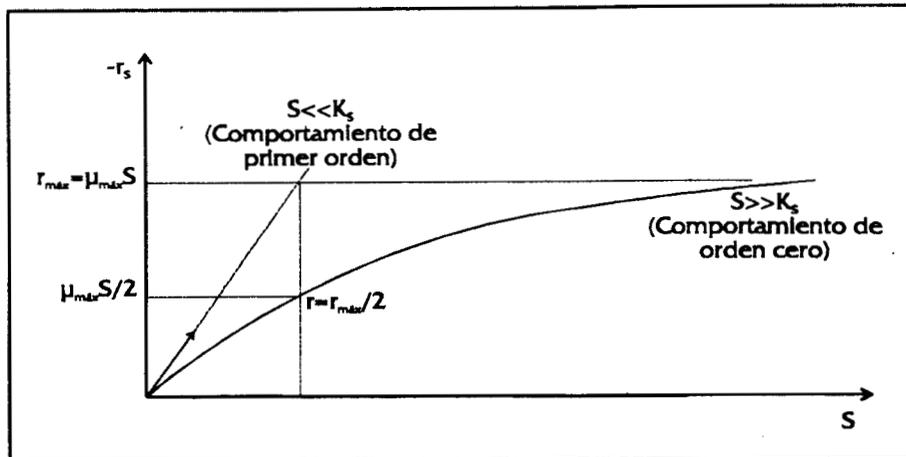


Fig. 2.2 Representación gráfica de las constantes de la ecuación de Monod.

Es posible que dos o más sustratos puedan simultáneamente limitar el crecimiento de los microorganismos, de tal forma que se puede proponer una dependencia de tipo Monod en la limitación de cada nutriente, y obtenerse:

$$\mu = \mu_{má} \left(\frac{S_1}{K_1 + S_1} \right) \left(\frac{S_2}{K_2 + S_2} \right) \dots \quad (2.2)$$

Esta ecuación es un indicador de que el crecimiento de los microorganismos depende de varios sustratos limitantes. Dado que la concentración de oxígeno es un factor importante en el crecimiento de la biomasa, se ha empleado una cinética en el modelo propuesto que involucra tanto al sustrato orgánico como al oxígeno y sustratos limitantes, este tipo de cinética ha sido utilizado por diversos autores (Livingston, 1991; Worden y Donaldson, 1987; Wagner y Hempel, 1988). De tal forma que la ecuación 2.2 se puede escribir como:

$$\mu = \mu_{má} \left(\frac{S}{K_s + S} \right) \left(\frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \right) \quad (2.3)$$

El crecimiento de los microorganismos se puede ver afectado por la inhibición del sustrato orgánico porque la mayoría de los compuestos a degradar son tóxicos. El modelo de inhibición será el utilizado por Chávez-Rivera (1994) obtenido de su trabajo experimental. El modelo es de inhibición por sustrato, basándose en el modelo que Luong propone (Chávez-Rivera, 1994):

$$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \left(\frac{S}{K_S + S} \right) \left(1 - \frac{S}{S_{m\acute{a}x}} \right)^n \quad (2.4)$$

donde $S_{m\acute{a}x}$ es la concentración límite del sustrato arriba de la cual el crecimiento de la biomasa es completamente inhibido. En el modelo se considera la disponibilidad del sustrato e inhibición por el mismo. En base al análisis de parámetros realizado por Chávez-Rivera (1994) el parámetro n se eligió igual a uno.

De tal forma que la tasa de crecimiento será dependiente de dos sustratos limitantes, el oxígeno y el sustrato orgánico, además de la inhibición por el sustrato orgánico, la expresión es la siguiente:

$$\mu = \mu_{m\acute{a}x} \left(\frac{S}{K_S + S} \right) \left(\frac{O_2}{K_{O_2} + O_2} \right) \left(1 - \frac{S}{S_{m\acute{a}x}} \right) \quad (2.5)$$

En un reactor con alimentación continua (el cual sirve para determinar los parámetros cinéticos de la ecuación de Monod) o cuando se pone en operación un reactor, se observan comportamientos cinéticos característicos en el crecimiento de las células en estado transiente. En un proceso semicontinuo el número de células vivientes varía con el tiempo, iniciándose con una fase lenta, donde no hay incremento en el número de células, continuando con un periodo de crecimiento rápido, durante el cual las células crecen exponencialmente con el tiempo (Figura 2.3). Esta fase se conoce como el periodo de crecimiento exponencial.

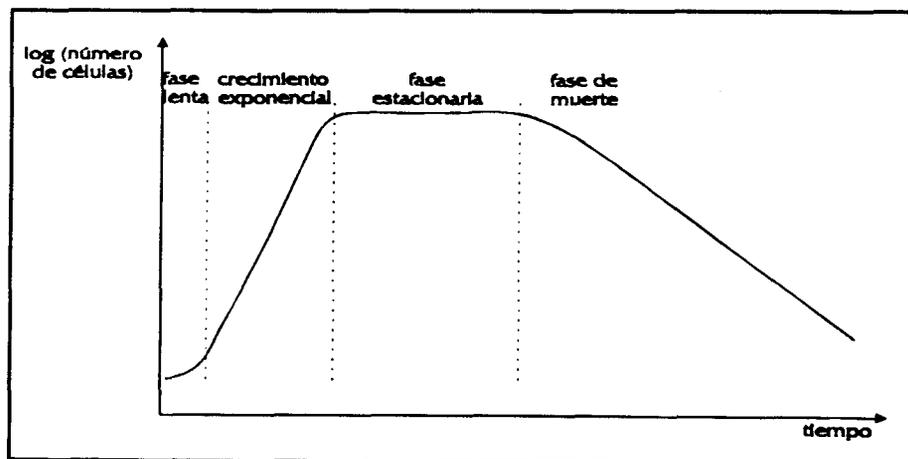


Fig. 2.3 Curva de crecimiento para un cultivo en lotes.

Una fase estacionaria sigue al periodo de crecimiento exponencial, en ese punto la población alcanza su máximo tamaño, dado que en un recipiente cerrado las células no se pueden multiplicar infinitamente. Eventualmente el número de células decrece y ocurre la fase de muerte existiendo una fase exponencial de muerte. Cada fase es de potencial importancia en procesos microbiológicos.

La etapa de muerte que se muestra en la Figura 2.3 es representada incluyendo un término de metabolismo endógeno al modelo de Monod. El metabolismo endógeno significa que hay reacciones en las células las cuales usan sustancias celulares para poder mantenerse, la constante de metabolismo endógeno está representada por k_d . Por lo tanto la expresión final para la cinética utilizada es:

$$r_x = \mu X - k_d X \quad (2.6)$$

2.6.2 Modelos para Reactores Biológicos

Cuando se están considerando reactores de planta piloto o reactores a escala industrial, la descripción cinética debe ser combinada con otros fenómenos limitantes que ocurren dentro del reactor, especialmente el mezclado y la transferencia de masa. El papel de estos fenómenos es más importante conforme la escala aumenta. La transferencia de oxígeno es un factor limitante para grandes concentraciones celulares. Esto justifica el estudio de la estimación de la solubilidad de oxígeno en el afluente y de coeficientes de transferencia de masa. Es por eso que resulta importante analizar la dinámica del oxígeno en las diferentes fases del reactor.

Para describir el comportamiento de los reactores biológicos Characklis(1983) clasifica los distintos modelos de la siguiente forma:

- Modelos de fenómenos de transporte. Involucran ecuaciones fenomenológicas de cambio, es decir, ecuaciones que describen la conservación de masa, momentum y energía.
- Modelos de balance de población. Se basan en la distribución de tiempos de residencia y de edad.

- Modelos empíricos. Son modelos de aproximaciones numéricas para describir datos empíricos.

En la mayoría de los trabajos realizados en este campo de investigación, los modelos que describen a los reactores biológicos son en dos fases, la fase líquida (sustrato y oxígeno disuelto) y la fase sólida (película microbiana). Por lo regular se desprecian las resistencias a la transferencia de masa en las fases gas y líquida y sólo consideran la difusión y las reacciones de consumo de sustrato y oxígeno dentro de la película.

Este es el caso de Worden y Donaldson (1987) que presentan un modelo dinámico para un reactor biológico de lecho fluidizado con película inmobilizada (modelo fenomenológico) que considera la difusión y reacción dentro de ésta, mezclado del líquido y crecimiento de la película (frontera móvil). Una de las limitaciones del modelo que presentan es que no consideran la existencia de una resistencia a la transferencia de masa de la fase líquida a la sólida, por lo que la concentración del sustrato en la superficie de la película es igual a la concentración del sustrato en el líquido. La representación que realizan del crecimiento de la película no es muy adecuada ya que limitan su crecimiento a un espesor máximo.

Del mismo modo Wagner y Hempel (1988) suponen que no existe una restricción interfásica líquido-sólido, y de un cultivo inmobilizado examinan los efectos de limitación difusional en la cinética de reacción para la formación de una película estable (modelo de fenómenos de transporte). Una conclusión relevante del modelo presentado por Wagner y Hempel es que la influencia más importante en la formación de la película es el fenómeno de difusión, ya que su incremento en el volumen está limitado a un máximo, donde el transporte difusivo sólo satisface el metabolismo endógeno de la bacteria en la superficie de las partículas. Esta estabilidad es lo que Sáez y Rittmann (1988) llaman una película en estado estacionario, es decir, aquella en la que la ganancia de biomasa (debido al crecimiento) está balanceada por la pérdida de masa debida a la muerte de células o por la pérdida de líquido y sólo se tiene una cantidad constante de biomasa activa por unidad de área superficial. El modelo que presentan (modelo empírico) define una película plana en estado estacionario, con densidad

celular y grosor local uniforme así como una capa de difusión, que representa la resistencia al transporte de masa. Por último definen una concentración mínima de sustrato en el volumen de la solución en función de la tasa de reacción y el factor de pérdidas por esfuerzos cortantes. La ventaja de escribir las ecuaciones de la película como el modelo Sáez y Rittmann es que en estado estacionario la concentración del sustrato en la película, y el grosor uniforme de ésta son función únicamente de la concentración del sustrato en la superficie de la película y de la concentración mínima de sustrato.

Skowlund y Kirmse (1989) proponen dos modelos empíricos para un reactor de película de lecho fijo: a) caso limitante de la película con un grosor constante de ésta, en el cual la difusión dentro de la película no es importante; b) el grosor de la película está limitado por la concentración del sustrato dentro de ésta. Skowlund y Kirmse (1989) basan su modelo en el desarrollado por Sáez y Rittmann (1988), y proponen una solución pseudoanalítica que simplifica el modelo cinético de la película, encontrando que para concentraciones bajas de sustrato la película es dependiente de la concentración del sustrato en el seno del líquido; sin embargo, abajo de una concentración mínima no hay crecimiento de biomasa. Mientras que altas concentraciones de sustrato en el líquido implican que el grosor activo de la película es constante e independiente de ésta, es decir, no hay problemas de difusión.

Andrews (1988) confirma este argumento proponiendo un modelo empírico y definiendo un factor de efectividad, clasificando a la película según su espesor, para películas delgadas todo el grosor está activo, en las películas gruesas la reacción se realiza preferentemente en la superficie, existiendo problemas de difusión molecular. El espesor de la película depende de la cinética, que a su vez es función de la concentración de células y de la concentración del sustrato en la fase líquida.

La mayoría de los modelos coinciden en suponer una concentración de biomasa constante, en todos los casos se observa que el representar el crecimiento de los microorganismos es el problema más grande. En el modelo propuesto por Livingston (1989 y 1991) para un reactor de lecho fluidizado, se considera la resistencia a la transferencia de masa a través de la capa del líquido que rodea a las biopartículas, la

difusión y la reacción dentro de éstas. Además considera los posibles efectos limitantes tanto del oxígeno como del sustrato en la cinética de la película. Dado que la concentración de biomasa es constante, su modelo le permite predecir la transición del sustrato al oxígeno como limitantes en la cinética de la película, encontrando una relación crítica entre el sustrato y el oxígeno disuelto. Lo más importante que encuentra es que la resistencia del líquido-sólido no debe despreciarse y que debe prestarse más atención al coeficiente de transferencia de masa líquido-sólido.

Por otro lado, Skowlund (1990), analiza la justificación del uso de modelos de película en estado estacionario. En la mayoría de los modelos se supone que la película alcanza un estado estacionario con respecto al consumo de sustrato aún cuando la película puede continuar incrementándose. Esto se ha justificado suponiendo un grosor de película constante igual a: a) al grosor de la película a la cual el flux del sustrato alcanza un valor constante (Sáez y Rittmann, 1988; Worden y Donaldson, 1988; Livingston, 1989, 1991); y b) suponiendo un grosor determinado por efectos de esfuerzos cortantes o desprendimiento por el movimiento del líquido en la capa exterior de la película (Wanner y Gujer, 1986).

Skowlund (1990), encontró que para un modelo que supone un crecimiento ilimitado de la película se muestra que aunque el grosor de la película pueda incrementarse, el volumen activo alcanza un valor constante. La distribución de la película activa a través de la película total predice que cerca de la interfase líquido-sólido, donde la mayoría de los microorganismos activos están localizados, su distribución será constante. Sólo cerca de la interfase película-soporte donde muy poco del volumen activo está localizado, la distribución activa será cada vez más delgada.

Wanner y Gujer (1986) proponen un modelo en el que se predicen cambios en el grosor de la película, y describe la dinámica y la distribución espacial de las especies microbianas. Proponen una relación entre la producción de masa y el volumen de expansión de la película fija mediante la ley de Fick que relaciona la conversión microbiana con la difusión molecular de los sustratos. En el estado estacionario, la concentración de sustrato en la película y en el líquido se consideran constantes y la producción neta de microorganismos se supone igual a la pérdida en el volumen del

líquido. Las respuestas obtenidas por este modelo predicen un crecimiento ilimitado de la biomasa, el crecimiento sólo está limitado cuando existe una fuerte restricción por esfuerzos cortantes o desprendimiento de las últimas capas de la película. Este comportamiento está de acuerdo con lo observado experimentalmente por Freitas dos Santos y Livingston (1995), dado que el grosor de la película crece hasta 1000 a 2000 μm para corrientes de flujos en paralelo y a contracorriente. También muestran que el incremento en el grosor de la película disminuye el flux del sustrato, esto confirma que existe un grosor óptimo que va de 200-400 μm , por lo que la hidrodinámica del sistema es determinante en el desarrollo y grosor de la película.

2.7 Conclusiones

De la revisión bibliográfica realizada se encontró que la mayoría de los modelos propuestos para describir el comportamiento de los reactores biológicos son en dos fases, despreciando la resistencia a la transferencia de masa del líquido al sólido, esto es debido a la dificultad de conocer ó estimar los coeficientes involucrados.

También la mayoría de los modelos supone una concentración de microorganismos fija lo que evita el modelar un crecimiento ilimitado de la misma, lo que ha sido comprobado experimentalmente. Lo más importante es que se llega a la conclusión de que existe un grosor activo fijo aun cuando se tenga un crecimiento ilimitado de la película de microorganismos.

Una limitante más en la modelación de los reactores biológicos, son los modelos cinéticos para describir el crecimiento de los microorganismos. Es por eso que el modelo que se usa para este trabajo involucra limitación por sustrato y oxígeno ya que éste es importante para un adecuado funcionamiento del reactor, así como una inhibición de crecimiento por el mismo sustrato limitante. Además también se considera un término por metabolismo endógeno necesario para que las células sigan manteniéndose y realizando sus funciones metabólicas.

CAPÍTULO 3

MODELO MATEMÁTICO

3.1 Introducción

Los modelos matemáticos son una aproximación a una parte muy simplificada de la realidad. Su uso permite la descripción, entendimiento y la optimización de cualquier proceso. Un modelo es la cuantificación de un proceso ya sea físico, químico o biológico, que permite predecir su comportamiento y consiste en un sistema de ecuaciones cuya solución a una alimentación de datos específicos es una representación de la respuesta del proceso a ese conjunto de valores de entrada (Denn, 1986).

El modelo propuesto en este trabajo describe el comportamiento dinámico de un reactor de película microbiana inmovilizada analizando las tres fases que lo conforman, así como todas las posibles resistencias que intervienen en el proceso de degradación de afluentes. Con el modelo propuesto se estudia la respuesta de los microorganismos en todo el espesor de la película ante cambios bruscos en la concentración de alimentación de sustrato y en el flujo de alimentación.

3.2 Descripción del Sistema Físico

El sistema físico que se modelo consiste en un reactor tipo "air-lift"; para fines de la modelación el sistema físico representa adecuadamente al sistema experimental el cual se describe en más detalle en el apéndice B. El esquema del reactor se presenta en la Figura 3.1, una corriente de gas se alimenta en la parte inferior del reactor, la cual asciende por un tubo concéntrico empujando a una corriente líquida. El líquido está

dividido en dos regiones, en la que sólo una está en contacto con la fase gas (tubo de ascenso), por la zona de descenso sólo hay líquido. La circulación del líquido en el reactor se debe a un mecanismo de transporte del gas.

La película de microorganismos se encuentra inmobilizada en un soporte sólido que conforma el tubo de ascenso. La corriente líquida es alimentada por la parte inferior del reactor circulando por la superficie del medio que soporta a los microorganismos en crecimiento. Conforme el flujo de agua residual fluye a través de la película microbiana, la materia orgánica soluble es metabolizada y la materia orgánica coloidal es adsorbida por la película.

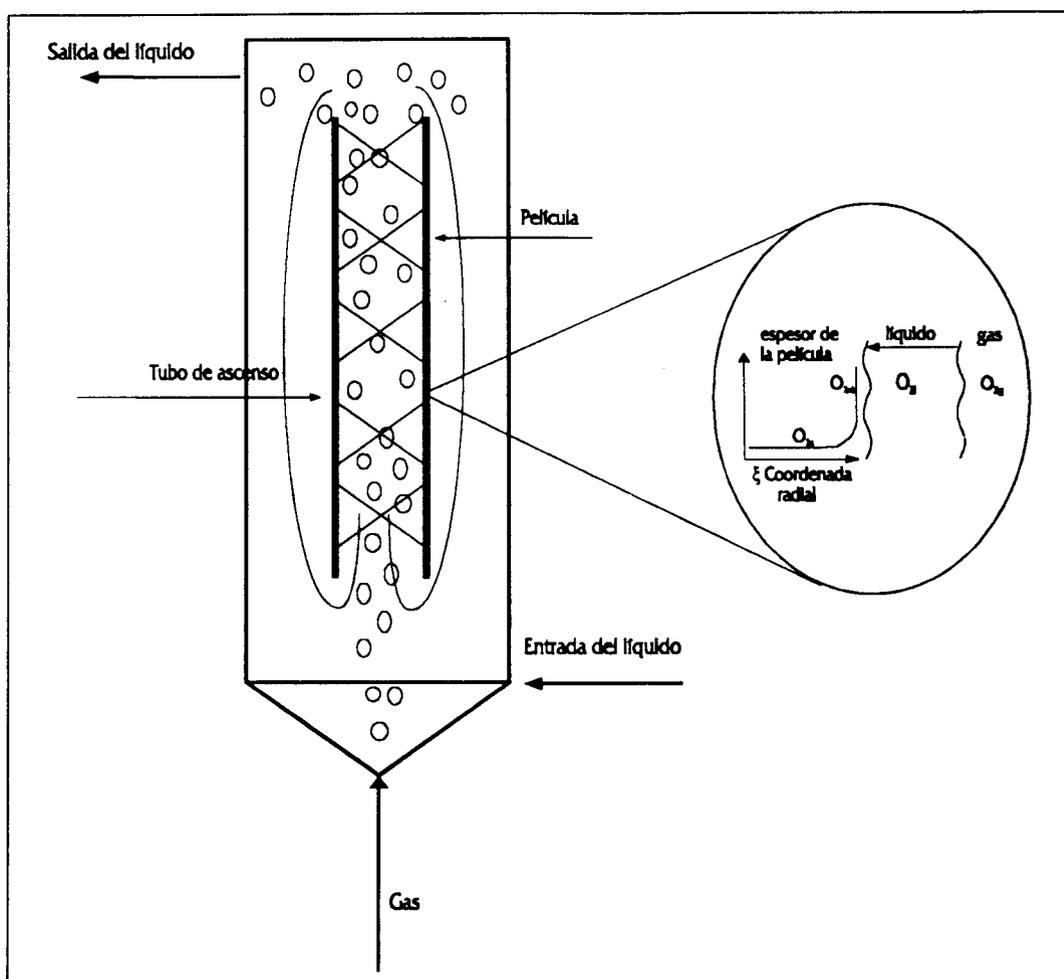


Figura 3.1 Esquema del reactor.

El oxígeno alimentado en el gas se disuelve en la corriente de agua residual y luego es extraído del líquido por las células. El coeficiente de transferencia de masa gas-líquido depende del sistema de aireación (tipo de difusor, tipo de mezclador y geometría del reactor). La transferencia de oxígeno aumenta al disminuir el tamaño de la burbuja, permitiendo un mayor tiempo de contacto y mejorando el mezclado. El oxígeno es primordial para prevenir las condiciones anaerobias en el sistema.

3.3 Suposiciones del Modelo Matemático

- El patrón de flujo de la fase gaseosa (aire) se describe como el de un reactor continuo de tanque agitado. Se considera que la concentración de oxígeno en cualquier punto del reactor es la misma.
- El patrón de flujo de la fase líquida (oxígeno disuelto y sustrato) se describe como el de un reactor continuo de tanque agitado. Esto es debido al tipo de reactor "airlift" que se está modelando. El líquido se considera perfectamente mezclado ya que como se ha señalado los patrones de flujo del líquido están perfectamente definidos por el flujo del aire.
- No hay coalescencia de burbujas, por lo que no existe variación en el diámetro de las mismas.
- La difusión molecular dentro de la película es la única forma de transporte en que los nutrientes pueden alcanzar a las células y de que los productos puedan salir de ella (Ley de Fick).
- La temperatura, el pH y la viscosidad se suponen constantes e iguales en todo el reactor.
- Por la forma física del sistema, los reactores biológicos son heterogéneos, de esta forma la fase sólida está conformada por un cultivo de microorganismos (biomasa), que será caracterizada por un modelo no-estructurado, con una dependencia del tipo Monod en la limitación del sustrato orgánico y del oxígeno así como inhibición por el

sustrato orgánico. El tipo de cinética que se emplea en el modelo se explica en forma extensiva en el capítulo 2.

- La producción de nueva biomasa depende del consumo de oxígeno y sustrato así como de una tasa de muerte de los microorganismos.
- Las propiedades físicas, químicas y biológicas de la película microbiana se suponen independientes del ambiente al cual la superficie está expuesta.

Propiedades físicas: La difusividad efectiva para el oxígeno, y el sustrato se consideran independientes de la densidad de la película. En este caso se considera que la difusividad efectiva es del 80% de su valor en agua (Fan *et al.*, 1990; Livingston, 1991).

Propiedades biológicas: Se supone que la biomasa forma una película homogénea (espesor, composición, y actividad) en la superficie del soporte.

- El crecimiento de los microorganismos se define como el aumento o disminución de la concentración promedio de organismos en la película.
- La película de microorganismos se supone una membrana permeable, por lo que los parámetros cinéticos se consideran los mismos tanto fuera como dentro de la película. Esta es una conclusión de la revisión bibliográfica realizada.
- Las fracciones del gas, líquido, y sólido presentes en el reactor se consideran constantes.
- No hay gradientes axiales en la concentración de la biomasa.
- El espesor de la película es constante.

Si el espesor de la película no fuera constante implicaría tener un problema de frontera móvil. De ser así el modelo matemático debería considerar que la masa, la fracción volumétrica del sólido, y la tasa de crecimiento de los microorganismos fueran

dependientes de la posición y del tiempo. El flux de la biomasa se expresaría en función de la velocidad a la cual los microorganismos son desplazados con respecto al soporte. Si la película crece o se encoge el espesor cambia, moviendo la interfase sólido-líquido y este cambio se debería tomar en cuenta. También deben considerarse los efectos por el esfuerzo cortante del líquido debido a la hidrodinámica del sistema y los efectos por desprendimiento de biomasa; así como la velocidad a la cual ésta es intercambiada de la película hacia el seno del líquido. Todas estas consideraciones implican la estimación o la medición de los parámetros involucrados; algunos de los cuales no pueden medirse experimentalmente.

3.4 Desarrollo del Modelo Matemático

El intercambio de materia entre las diferentes regiones está gobernado por ecuaciones de cambio que describen la conservación de masa para los compuestos limitantes en la cinética de la reacción.

Las ecuaciones de conservación o balances se pueden expresar de la siguiente forma (Characklis, 1983):

$$\left[\begin{array}{c} \text{Tasa neta de} \\ \text{acumulación en el} \\ \text{volumen del} \\ \text{sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Tasa de transporte} \\ \text{que entra a través de} \\ \text{la superficie del sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Tasa de transporte} \\ \text{que sale a través de} \\ \text{la superficie del sistema} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Tasa de generación} \\ \text{en el volumen del} \\ \text{sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Tasa de consumo} \\ \text{en el volumen del} \\ \text{sistema} \end{array} \right] \quad (3.1)$$

Todos los balances de sustrato, oxígeno, y biomasa en las tres fases del reactor, están referidos al volumen total del mismo.

Fase gas

Oxígeno: El oxígeno se difunde de la fase gaseosa hacia la fase líquida, donde se disuelve. En la interfase gas-líquido las concentraciones están en equilibrio, la relación de equilibrio para soluciones diluidas se expresa en términos de la ley de Henry como:

$$P_{ai} = H X_{ai}^* \quad (3.2)$$

donde P_{ai} es la presión parcial del gas en la interfase gas-líquido, (Pa); H es la constante de Henry, (Pa/fracción molar); X_{ai}^* es la fracción del líquido en equilibrio con el gas, (fracción molar). Dado que el patrón de flujo es el de un mezclado perfecto, el balance de materia es el siguiente:

$$\frac{d(O_{2g} \varepsilon_g V_T)}{dt} = F_g O_{2g}|_E - F_g O_{2g}|_S - k_g a_{vgl} V_T \varepsilon_g (O_{2g} - O_{2gint}) \quad (3.3)$$

El soluto (oxígeno en el gas) es relativamente insoluble en el líquido (H , constante de Henry: 4.81×10^9 Pa/fracc. mol; Perry, 1973), de tal forma que al comparar las resistencias del gas y del líquido:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{Hk_g} + \frac{1}{k_L} \quad (3.4)$$

la resistencia del gas es despreciable lo que implica que $K_L = k_L$ (K_L , coeficiente de transferencia de masa global en el líquido), por lo que toda la resistencia a la transferencia de masa se encuentra del lado del líquido:

$$\text{Flux} = K_L (O_{2leq} - O_{2l}) \quad (3.5)$$

donde

$$O_{2leq} = \frac{P_{O2g}}{H} = O_{2g} \left(\frac{RT}{H} \cdot \frac{\rho_{H2O}}{MM_{H2O}} \right) \quad (3.6)$$

$$H^* = \left(\frac{RT}{H} \cdot \frac{\rho_{H2O}}{MM_{H2O}} \right) \quad (3.7)$$

Suponiendo que el flujo volumétrico de entrada y salida es el mismo, el balance de masa para el oxígeno en la fase gas es:

$$\frac{d(O_{2g} \varepsilon_g V_T)}{dt} = F_g (O_{2gE} - O_{2g}) - K_L a_{vgl} V_T \varepsilon_g (O_{2g} H^* - O_{2l}) \quad (3.8)$$

simplificando la ecuación y suponiendo que la fracción del gas en el reactor es constante, se obtiene:

$$\frac{dO_{2g}}{dt} = \frac{F_g}{V_T \epsilon_g} (O_{2gE} - O_{2g}) - K_L a_{vgl} \frac{\epsilon_l}{\epsilon_g} (O_{2g} H^* - O_{2l}) \quad (3.9)$$

$$\text{C.I. } @ t = 0: O_{2g}(0) = O_{2g0} \quad (3.9a)$$

donde O_{2g} es la concentración del oxígeno en el gas, F_g es el flujo volumétrico de alimentación del gas, V_T es el volumen total del reactor, ϵ_g y ϵ_l son las fracciones correspondientes al gas y al líquido presentes en el reactor, y a_{vgl} es el área interfacial gas-líquido.

El balance de masa expresa que la acumulación de oxígeno en la fase gas es igual al flujo de entrada menos la salida de aire, menos la transferencia de oxígeno de la fase gas a la líquida. La condición inicial supone una concentración de oxígeno existente en las tres fases del reactor, la cual para fines de simulación es ficticia con el objeto de encontrar un estado estacionario posible.

Fase líquida

Oxígeno: En este caso se acoplan los balances de oxígeno en la fase líquida y en la fase sólida por medio de la concentración que tendría el oxígeno en la superficie de la película. La resistencia en la fase líquida y cerca de la interfase gas-líquido es importante, debido a la baja solubilidad del oxígeno en soluciones acuosas.

$$\frac{d(O_{2l} \epsilon_l V_T)}{dt} = F_l O_{2l}|_E - F_l O_{2l}|_S + K_L a_{vgl} V_T \epsilon_l (O_{2g} H^* - O_{2l}) - k_{ls} a_{vls} V_T \epsilon_s (O_{2l} - O_{2sb}) \quad (3.10)$$

Si se supone que todo el contenido del reactor tiene la misma densidad y que las tasas de flujo en la entrada y salida son las mismas, esto implica que el volumen del reactor es constante, entonces el balance de masa final es:

$$\frac{dO_{2l}}{dt} = \frac{F_l}{V_T \epsilon_l} (O_{2lE} - O_{2l}) + K_L a_{vgl} (O_{2g} H^* - O_{2l}) - k_{ls} a_{vls} \frac{\epsilon_s}{\epsilon_l} (O_{2l} - O_{2sb}) \quad (3.11)$$

$$\text{C.I. } @ t = 0: O_{2l}(0) = O_{2l0} \quad (3.11a)$$

donde O_{2l} es la concentración del oxígeno en el líquido, O_{2sb} es la concentración del oxígeno en la superficie de la película, k_{ls} es el coeficiente de transferencia de masa local líquido-sólido, a_{vis} es el área interfacial líquido-sólido y F_l es el flujo de alimentación del líquido.

Sustrato: El comportamiento dinámico del sustrato está determinado por el flujo convectivo (entrada menos salida del flujo de alimentación), menos la transferencia de masa de la fase líquida a la superficie de la película. Su patrón de flujo se supone que es el de un reactor de tanque agitado perfectamente mezclado. El balance de materia es el siguiente:

$$\frac{d(S_l \epsilon_l V_T)}{dt} = F_l S_l|_E - F_l S_l|_S - k_{ls} a_{vis} V_T \epsilon_s (S_l - S_{sb}) \quad (3.12)$$

Haciendo las mismas consideraciones que para el oxígeno en los flujos de alimentación de entrada y salida se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{dS_l}{dt} = \frac{F_l}{V_T \epsilon_l} (S_{lE} - S_l) - k_{ls} a_{vis} \frac{\epsilon_s}{\epsilon_l} (S_l - S_{sb}) \quad (3.13)$$

$$\text{C.I.} \quad @ \quad t = 0: S_l(0) = S_{l0} \quad (3.13a)$$

donde S_l es la concentración del sustrato en el líquido, y S_{sb} en la superficie de la película.

Fase sólida

La película de microorganismos (fase sólida) se considera como una estructura plana, y se describen los cambios en la concentración del sustrato, oxígeno, y biomasa únicamente en dirección perpendicular al soporte al cual están inmovilizadas las células. La transferencia de masa a través de la película se supone por difusión, siguiendo la ley de Fick de forma unidimensional. Los balances de masa describen este fenómeno así como el consumo de sustrato y oxígeno dentro de la película por reacción (Figura 3.2).

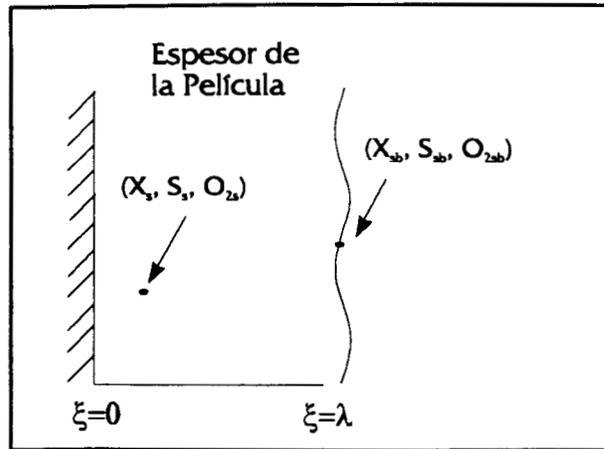


Figura 3.2. Geometría de la Película.

Oxígeno: El balance de masa representa los cambios en la concentración de oxígeno debido a la transferencia de masa por difusión y a la reacción de consumo en la película. La resistencia cerca de la fase líquida y en la interfase líquido-sólido es significativa por la diferencia de densidad entre el medio continuo y la fase sólida.

$$\frac{\partial(O_{2s}\epsilon_s)}{\partial t} = D_{ef,O_2} \frac{\partial^2(O_{2s}\epsilon_s)}{\partial \xi^2} - R_{O_2}\epsilon_s \quad (3.14)$$

$$\text{C.I. } @ t=0: O_{2s}(0) = O_{2s0} \quad (3.14a)$$

$$\text{C.F1. } \text{en } \xi=0 \quad \forall t>0: \frac{\partial O_{2s}}{\partial \xi} = 0 \quad (3.14b)$$

$$\text{C.F2. } \text{en } \xi=\lambda \quad \forall t>0: -D_{ef,O_2} \frac{\partial O_{2s}}{\partial \xi} = k_{ls}(O_{2sb} - O_{2l}) \quad (3.14c)$$

$$\text{donde } R_{O_2} = \frac{\mu_{máx}}{Y_{X/O_2}} \left(\frac{O_{2s}}{K_{O_2} + O_{2s}} \right) \left(\frac{S_s}{K_S + S_s} \right) \left(1 - \frac{S_s}{S_{máx}} \right) X_s \quad (3.14d)$$

donde O_{2s} es la concentración del oxígeno, S_s del sustrato, y X_s de la biomasa en la fase sólida, ϵ_s es la fracción del sólido presente en el reactor, D_{ef} es la constante de la difusividad, λ es el espesor de la película, y $\mu_{máx}$ es la tasa de máximo crecimiento de los microorganismos.

La condición de frontera 1 supone que el flux difusivo es cero debido a que la pared del soporte es impermeable. La segunda condición expresa que todo el flux difusivo a través de la película es igual al transporte de la fase líquida a la interfase líquido-sólido.

Sustrato: El balance de masa para el sustrato considera el término de acumulación, la difusión y la reacción de consumo en la película. En las condiciones de frontera se acoplan tanto la concentración del sustrato en la superficie de la película como la concentración en el seno del líquido. Se ha observado que para concentraciones bajas de sustrato, el grosor de la película es dependiente de su concentración en el seno del líquido.

$$\frac{\partial(S_s \varepsilon_s)}{\partial t} = D_{ef,s} \frac{\partial^2(S_s \varepsilon_s)}{\partial \xi^2} - R_s \varepsilon_s \quad (3.15)$$

$$C.I. \quad @ \quad t = 0: S_s(0) = S_{s0} \quad (3.15a)$$

$$C.F1. \quad \text{en } \xi = 0 \quad \forall \quad t > 0: \frac{\partial S_s}{\partial \xi} = 0 \quad (3.15b)$$

$$C.F2. \quad \text{en } \xi = \lambda \quad \forall \quad t > 0: -D_{ef,s} \frac{\partial S_s}{\partial \xi} = k_{ls}(S_{sb} - S_l) \quad (3.15c)$$

donde

$$R_s = \frac{\mu_{máx}}{Y_{x/s}} \left(\frac{O_{2s}}{K_{O_2} + O_{2s}} \right) \left(\frac{S_s}{K_s + S_s} \right) \left(1 - \frac{S_s}{S_{máx}} \right) X_s \quad (3.15d)$$

Biomasa: Para la película microbiana se estudia el crecimiento de los microorganismos principalmente por limitación de sustrato y oxígeno, tomando en cuenta la inhibición por el sustrato y una constante por metabolismo endógeno de las células. El cambio en la concentración de microorganismos se entiende como el aumento o la disminución de organismos en un determinado volumen de película. La cinética de crecimiento está dada por la ecuación (2.6).

$$\frac{d(X_s \varepsilon_s)}{dt} = R_x \varepsilon_s \quad (3.16)$$

$$\text{C.l. } @ t = 0: X_s(0) = X_{s0} \quad (3.16a)$$

donde

$$R_x = \mu_{máx} \left(\frac{O_{2s}}{K_{O_2} + O_{2s}} \right) \left(\frac{S_s}{K_s + S_s} \right) \left(1 - \frac{S_s}{S_{máx}} \right) X_s - k_d X_s \quad (3.16b)$$

Los microorganismos cerca de la superficie donde la concentración de sustrato (nutrientes) es alta están en una fase de crecimiento acelerado, mientras que los microorganismos que están cerca del soporte se encuentran en un probable estado de muerte si no existe suficiente sustrato y oxígeno.

3.5 Variables Adimensionales

La idea de adimensionalizar las variables de un modelo, es producir una solución que sea válida para un rango de parámetros y hacer que las ecuaciones originales contengan menos parámetros. Además el uso de los métodos numéricos con variables adimensionales facilita la solución del problema.

- La concentración de oxígeno en cada una de las fases se adimensionalizó en términos de la concentración de oxígeno en la fase gas, esto es, la máxima concentración posible en el reactor, O_{2ref} .

De tal forma que las variables adimensionales son:

$$O_{2g}^{\cdot} = O_{2g}/O_{2ref}, \text{ concentración adimensional en la fase gas,}$$

$$O_{2l}^{\cdot} = O_{2l}/O_{2ref}, \text{ concentración adimensional en la fase líquida,}$$

$$O_{2s}^{\cdot} = O_{2s}/O_{2ref}, \text{ concentración adimensional en la fase sólida.}$$

- Para el sustrato, la concentración de adimensionalización es la concentración del sustrato en la fase líquida, S_{ref} .

$$S_l^{\cdot} = S_l/S_{ref}, \text{ concentración adimensional en la fase líquida,}$$

$$S_s^{\cdot} = S_s/S_{ref}, \text{ concentración adimensional en la fase sólida.}$$

- La biomasa se adimensionalizó con la concentración inicial de microorganismos en el reactor, X_{ref} .

$$X_s^* = X_s / X_{ref}$$

- La coordenada espacial de la película se adimensionalizó en términos de un grosor conocido de ésta, λ .

$$\zeta = \xi / \lambda$$

- El proceso más lento es la reacción bioquímica, por lo que el tiempo de referencia es la tasa máxima de crecimiento de los microorganismos, $\mu_{máx}$.

$$t_{ref} = 1 / \mu_{máx}, \text{ es decir } t^* = t / t_{ref}$$

3.6 Modelo Matemático Adimensional

Fase gas

Oxígeno

$$\frac{dO_{2g}^*}{dt^*} = \tau_1 (O_{2gE}^* - O_{2g}^*) - K_L^* \epsilon_{lg} (O_{2g}^* H^* - O_{2l}^*) \quad (3.17)$$

$$\text{C.l. } @ t^* = 0: O_{2g}^*(0) = O_{2g0}^* \quad (3.17a)$$

donde H^* está definida en la ecuación (3.7) y

$$\tau_1 = \frac{F_g}{V_T \epsilon_g \mu_{máx}} \quad (3.17b);$$

$$K_L^* = \frac{K_L a_{vgl}}{\mu_{máx}} \quad (3.17c);$$

$$\epsilon_{lg} = \frac{\epsilon_l}{\epsilon_g} \quad (3.17d)$$

Fase líquida

Oxígeno

$$\frac{dO_{2l}^*}{dt^*} = \tau_2 (O_{2lE}^* - O_{2l}^*) + K_L^* (O_{2g}^* H^* - O_{2l}^*) - K_{LS}^* \epsilon_{sl} (O_{2l}^* - O_{2sb}^*) \quad (3.18)$$

$$\text{C.l. } @ t^* = 0: O_{2l}^*(0) = O_{2l0}^* \quad (3.18a)$$

donde H' está definida en la ecuación (3.7) y

$$\tau_2 = \frac{F_1}{V_T \varepsilon_1 \mu_{\text{máx}}} \quad (3.18b);$$

$$K_{LS}^* = \frac{k_{LS} a_{vis}}{\mu_{\text{máx}}} \quad (3.18c);$$

$$\varepsilon_{sl} = \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_1} \quad (3.18d)$$

Sustrato

$$\frac{dS_1^*}{dt^*} = \tau_2 (S_{1E}^* - S_1^*) - K_{LS}^* \varepsilon_{sl} (S_1^* - S_{1sb}^*) \quad (3.19)$$

$$\text{C.I.} \quad @ \quad t^* = 0: S_1^*(0) = S_{10}^* \quad (3.19a)$$

Fase sólida

Oxígeno

$$\frac{\partial O_{2s}^*}{\partial t^*} = \frac{1}{\phi_{O_2}} \frac{\partial^2 O_{2s}^*}{\partial \zeta^2} - \hat{R}_{O_2} \quad (3.20)$$

$$\text{C.I.} \quad @ \quad t^* = 0: O_{2s}^*(0) = O_{2s0}^* \quad (3.20a)$$

$$\text{C.F1.} \quad \text{en } \zeta = 0 \quad \forall \quad t^* > 0: \frac{\partial O_{2s}^*}{\partial \zeta} = 0 \quad (3.20b)$$

$$\text{C.F2.} \quad \text{en } \zeta = 1 \quad \forall \quad t^* > 0: \frac{\partial O_{2s}^*}{\partial \zeta} = Bi_{O_2} (O_{2sb}^* - O_{21}^*) \quad (3.20c)$$

$$\text{donde} \quad \hat{R}_{O_2} = \frac{1}{Y_{X/O_2}} \left(\frac{O_{2s}^*}{K_{O_2} + O_{2s}^*} \right) \left(\frac{S_s^*}{K_s + S_s^*} \right) \left(1 - \frac{S_s^*}{S_{\text{máx}}^*} \right) X_s^* \quad (3.20d)$$

$$\text{y} \quad Bi_{O_2} = \frac{\lambda k_{ls}}{D_{ef,O_2}} = \frac{\lambda / D_{ef,O_2}}{1 / k_{ls}} \quad (3.20e); \quad \phi_{O_2} = \frac{\mu_{\text{máx}} \lambda^2}{D_{ef,O_2}} \quad (3.20f); \quad Y_{X/O_2} = \frac{Y_{X/O_2} O_{2ref}}{X_{ref}} \quad (3.20g)$$

Sustrato

$$\frac{\partial S_s^*}{\partial t^*} = \frac{1}{\phi_s} \frac{\partial^2 S_s^*}{\partial \zeta^2} - \hat{R}_s \quad (3.21)$$

$$\text{C.I.} \quad @ \quad t^* = 0: S_s^*(0) = S_{s0}^* \quad (3.21a)$$

$$\text{C.F1. en } \zeta = 0 \quad \forall t^* > 0: \quad \frac{\partial S_s^*}{\partial \zeta} = 0 \quad (3.21b)$$

$$\text{C.F2. en } \zeta = 1 \quad \forall t^* > 0: \quad \frac{\partial S_s^*}{\partial \zeta} = \text{Bi}_s (S_{sb}^* - S_s^*) \quad (3.21c)$$

$$\text{donde} \quad \hat{R}_s = \frac{1}{Y_{x/s}^*} \left(\frac{O_{2s}^*}{K_{O_2}^* + O_{2s}^*} \right) \left(\frac{S_s^*}{K_s^* + S_s^*} \right) \left(1 - \frac{S_s^*}{S_{máx}^*} \right) X_s^* \quad (3.21d)$$

$$\text{y} \quad \text{Bi}_s = \frac{\lambda k_{ls}}{D_{ef,s}} = \frac{\lambda / D_{ef,s}}{1/k_{ls}} \quad (3.21e); \quad \phi_s = \frac{\mu_{máx} \lambda^2}{D_{ef,s}} \quad (3.21f); \quad Y_{x/s}^* = \frac{Y_{x/s} S_{ref}}{X_{ref}} \quad (3.21g)$$

Las ecuaciones 3.20e y 3.21e, representan el número de Biot para el oxígeno y el sustrato respectivamente. El número de Biot indica la relación entre las resistencias interna y externa de transporte de masa, de tal forma que: $\text{Biot} = \frac{\text{resistencia interna}}{\text{resistencia externa}}$; números de Biot muy grandes ($\text{Biot} \rightarrow \infty$), indican que la resistencia al transporte externo de masa es despreciable con respecto a la difusión en la película (Froment y Bischoff, 1990).

Las ecuaciones 3.20f y 3.21f representan el número de Damköhler, (Da_{II}) para el oxígeno y el sustrato respectivamente. El número de Damköhler indica la relación entre la tasa de reacción y la transferencia de masa por difusión en la película (Froment y Bischoff, 1990).

Biomasa

$$\frac{dX_s^*}{dt^*} = \hat{R}_x \quad (3.22)$$

$$\text{C.I. @ } t^* = 0: \quad X_s^*(0) = X_{s0}^* \quad (3.22a)$$

$$\text{donde} \quad \hat{R}_x = \left(\frac{O_{2s}^*}{K_{O_2}^* + O_{2s}^*} \right) \left(\frac{S_s^*}{K_s^* + S_s^*} \right) \left(1 - \frac{S_s^*}{S_{máx}^*} \right) X_s^* - k_d X_s^* \quad (3.22b)$$

$$y \quad K_{O_2}^* = \frac{K_{O_2}}{O_{2ref}} \quad (3.22c); \quad K_s^* = \frac{K_s}{S_{ref}} \quad (3.22d); \quad k_d^* = \frac{k_d}{\mu_{máx}} \quad (3.22e)$$

3.7 Métodos de Solución

El modelo matemático consta de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias resultantes de los balances de masa para el oxígeno en las fases gas (3.17) y líquida (3.18); para el sustrato en la fase líquida (3.19); y para la biomasa en la fase sólida (3.22). Dos ecuaciones diferenciales parciales parabólicas no-lineales describen el comportamiento del oxígeno (3.20), y el sustrato (3.21), en la fase sólida.

El método numérico que se considera adecuado para discretizar las ecuaciones parciales es el método de colocación ortogonal en elemento finito, ya que en la película se encuentran perfiles en que la concentración de sustrato y oxígeno tienen gradientes importantes (Finlayson, 1980). El método de colocación ortogonal en elemento finito es una combinación de dos métodos; el de colocación ortogonal ofrece ventajas al disminuir el error de truncamiento cuando se discretizan las ecuaciones diferenciales parciales en ordinarias las cuales sólo son función del tiempo. A su vez el método de diferencias finitas permite la localización de puntos donde es necesario conocer la solución.

El número de elementos que se considero adecuado para seccionar la película microbiana es dos, los elementos pueden ser utilizados cerca de los gradientes considerables y la solución que se genera es mejorada. Los elementos en que se dividió la película sirven para mejorar la descripción cualitativa de los perfiles generados en la película. Cada elemento contiene dos puntos de colocación interiores, lo que implica tener siete puntos en total en la película. De tal forma que en cada punto será posible estimar la concentración del sustrato, oxígeno y microorganismos. El uso de dos y hasta cuatro puntos de colocación da una aproximación cualitativa de la solución (Finlayson, 1980); en este caso, el uso de siete puntos se considera adecuado ya que se logra una mejor aproximación tanto cuantitativa como cualitativa de la solución.

Todo el conjunto de ecuaciones ordinarias se integraron por medio de un método implícito. El método implícito se eligió por la no-linealidad del sistema de ecuaciones, lo que permite minimizar el error que se genera al integrar las ecuaciones. Los métodos numéricos utilizados se explican en detalle en el apéndice A.

3.8 Conclusiones

En contraste con los modelos de dos fases que regularmente se encuentran en la literatura, el presente trabajo analiza a las tres fases de un reactor biológico (aerobio), tipo "airlift", tomando en cuenta la transferencia de masa entre el gas y el líquido y del líquido al sólido. Una de las limitaciones del modelo es que no se considera el crecimiento del espesor de la película, sin embargo esto está representado como el aumento o disminución de la concentración promedio de microorganismos en un espesor fijo de película.

Esta representación del crecimiento de la biomasa nos permite dividir a la película en volúmenes y conocer lo que sucede en la capa más interna así como en la más externa, de esta forma se analiza el comportamiento de las diferentes capas de microorganismos en la película.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y ANÁLISIS

4.1 Introducción

La razón de la obtención de un modelo matemático es predecir el comportamiento esperado de un proceso bajo un rango de condiciones de entrada. Las simulaciones que se realizaron en este trabajo se hicieron dependiendo de la aplicabilidad del proceso. La validación del modelo es esencial, dado que se debe probar su capacidad antes de ser aplicado a nuevas situaciones para probar los límites del proceso estudiado. La validación es usualmente vista como una comparación entre algunas predicciones y mediciones de gran significado para el proceso, es decir, casos muy representativos.

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos, su análisis y la validación realizada con datos experimentales de Chávez-Rivera (1994).

4.2 Generalidades

Los parámetros cinéticos para el oxígeno, difusividades y espesores de película típicos utilizados en las simulaciones se obtuvieron de la literatura, mientras que la dimensión del reactor, coeficientes de transferencia de masa y parámetros cinéticos para el sustrato fueron tomados del trabajo de Chávez-Rivera (1994). La 3-4 dicloroanilina es el compuesto xenobiótico (sustrato orgánico) del cual se tomaron los datos cinéticos. Los parámetros usados se especifican en el apéndice B, (Tablas B.1, B.2, B.3, y B.4),

también se describe en forma general el reactor experimental a partir del cual se tomaron los parámetros.

En general se analiza la capacidad del modelo ante cambios bruscos tipo escalón en la corriente de alimentación del reactor en estudio, es decir, reduciendo flujos de alimentación del líquido o aumentando la concentración del sustrato. Como se ha explicado en el capítulo 1, los flujos de alimentación y concentraciones del sustrato orgánico normalmente no son constantes en un reactor de tratamiento de afluentes. Es por eso que se eligieron dos flujos de alimentación como referencia, y de esta forma poder comparar entre sí y con lo reportado en la literatura.

Es interesante comparar la dinámica del sistema ante los mismos cambios para estos dos flujos de alimentación, lo cual implica tener dos tiempos de residencia del líquido, manteniendo el volumen del líquido constante. Los flujos de alimentación estudiados son:

- Flujo de alimentación 1: $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, es decir, tiempo de residencia = 2.01 hr
- Flujo de alimentación 2: $4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, es decir, tiempo de residencia = 4.96 hr

4.3 Comportamiento del Modelo

4.3.1 El Estado Estacionario

El estado estacionario se eligió cuando el valor absoluto de la diferencia en la concentración del sustrato y oxígeno con respecto al tiempo es menor que una tolerancia de 1×10^{-7} . Para la biomasa el estado estacionario se eligió cuando el valor absoluto de la diferencia en la concentración promedio de microorganismos en la película con respecto al tiempo es menor que una tolerancia de 1×10^{-7} . La forma de cálculo de ésta concentración promedio se explica en detalle en el apéndice A. Para este modelo un cambio en la concentración de microorganismos se establece como el aumento o la disminución promedio de organismos en un volumen fijo de película.

La simulación fue iniciada aproximándose a un estado estacionario de acuerdo a los parámetros de las tablas B.1, B.2 y B.3 (Apéndice B), alcanzándose el mismo estado cuando la concentración de alimentación del sustrato es de 0.100 kgm^{-3} , y siempre que

exista una concentración inicial de microorganismos y éstos no estén inhibidos. Las condiciones iniciales para el oxígeno, el sustrato y la biomasa fueron valores arbitrarios que se asignaron con el fin de poder simular el arranque del reactor y encontrar un estado estacionario a partir del cual se pudieran efectuar los escalones mencionados.

En el caso de las gráficas que se refieren a la película microbiana que muestran los perfiles de oxígeno, de sustrato y de biomasa en los diferentes puntos de la película (1-7), éstos están ordenados de la siguiente forma: el punto 1 es aquel que se encuentra en contacto con el soporte sólido, mientras que el punto 7 está en contacto con el líquido (Figura 4).

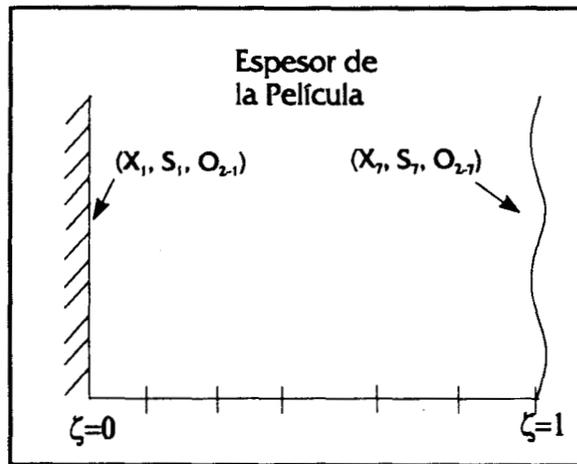


Figura 4 Representación esquemática de los puntos de colocación en la película.

Con el fin de encontrar el estado estacionario para los dos flujos de alimentación antes mencionados, se hicieron las siguientes simulaciones, las cuales representan el arranque del reactor:

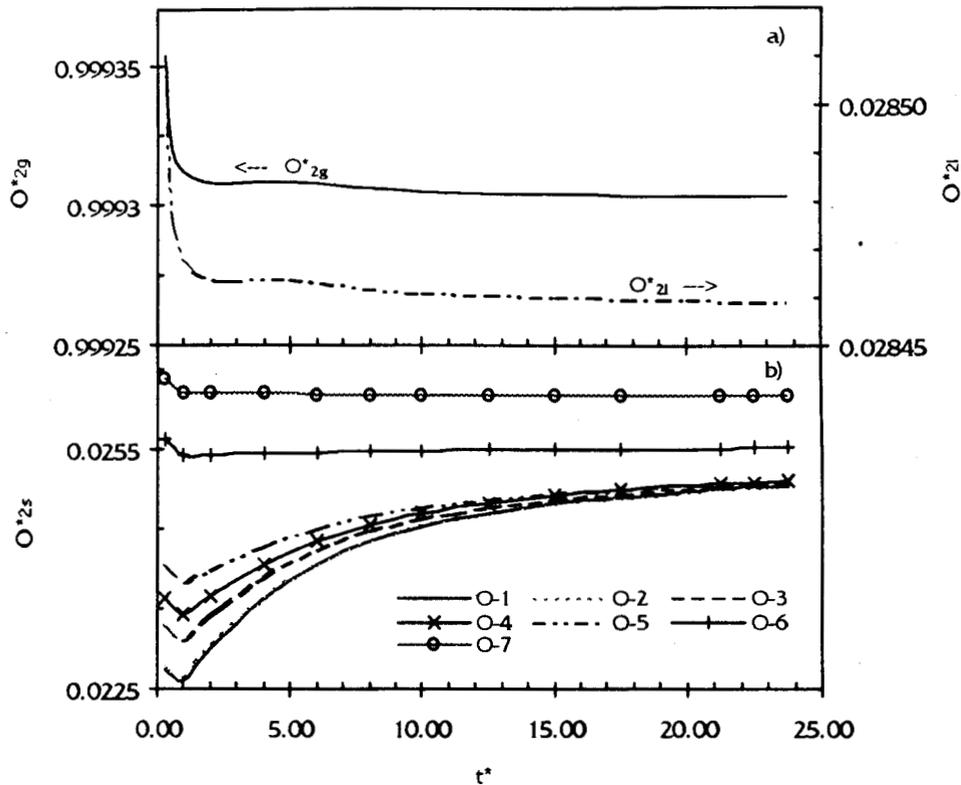
- Caso 1: Flujo de alimentación: $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$
- Caso 2: Flujo de alimentación: $4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

A partir del estado estacionario que se encuentre por el modelo para los dos casos mencionados se realizarán los cambios tipo escalón en la concentración y flujo de alimentación del sustrato orgánico (3-4 dicloroanilina).

Es importante señalar que para ambos casos todos los parámetros cinéticos y de transporte de masa son iguales, ver Tablas B.1, B.2 y B.3 (Apéndice B).

El comportamiento del oxígeno en la fase gas para los casos 1 y 2 sigue la misma tendencia (Figuras 4.1a y 4.2a), alcanzando rápidamente un estado estacionario. El estado estacionario que predice el modelo para la concentración de oxígeno en el gas es de un valor alto, es decir, se predice que en el reactor existe suficiente oxígeno que puede ser utilizado para la oxidación de la materia orgánica.

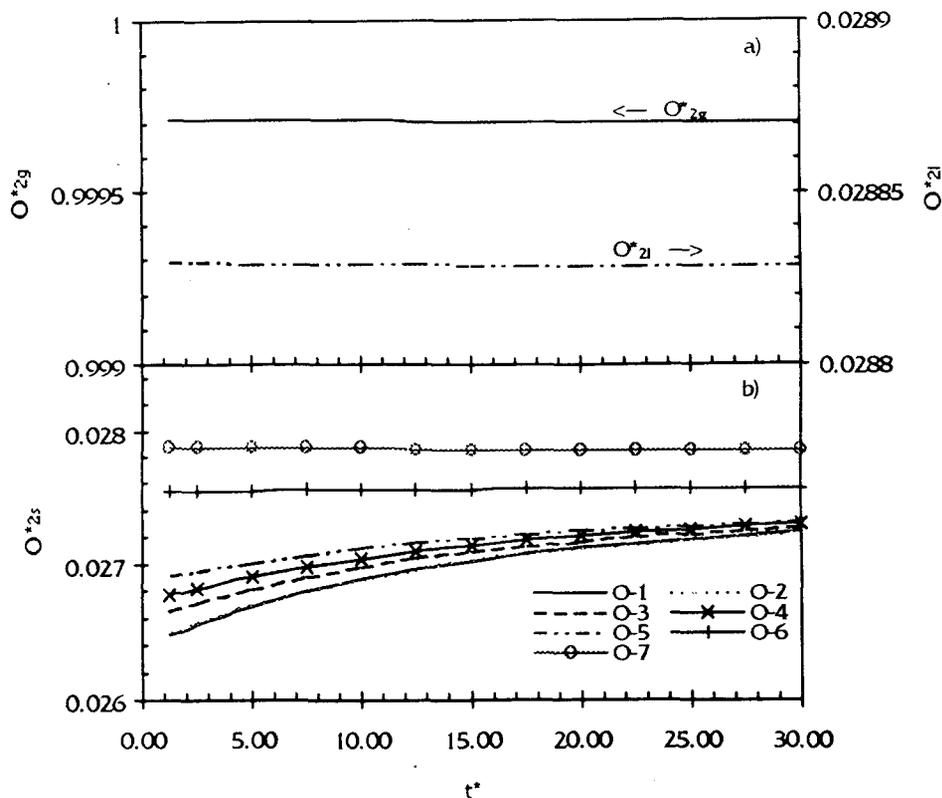
CASO 1



Figuras 4.1 Concentración de oxígeno a) fase gas y líquida, b) fase sólida.

El oxígeno en el líquido (Figuras 4.1a y 4.2a) alcanza rápidamente un estado estacionario, no existiendo gradientes muy marcados en su concentración. Se observa claramente que para este modelo que considera que las fases gas y líquida se encuentran perfectamente mezcladas, el transporte del oxígeno de la fase gas a la fase líquida no es el fenómeno más importante en el proceso debido al valor de los parámetros cinéticos y de transporte usados en la simulación. De tal forma que siempre existe suficiente oxígeno disponible en el gas, el cual se difunde y es consumido por los microorganismos que conforman la película, (Figuras 4.1b y 4.2b).

CASO 2



Figuras 4.2 Concentración de oxígeno a) fase gas y líquida, b) fase sólida.

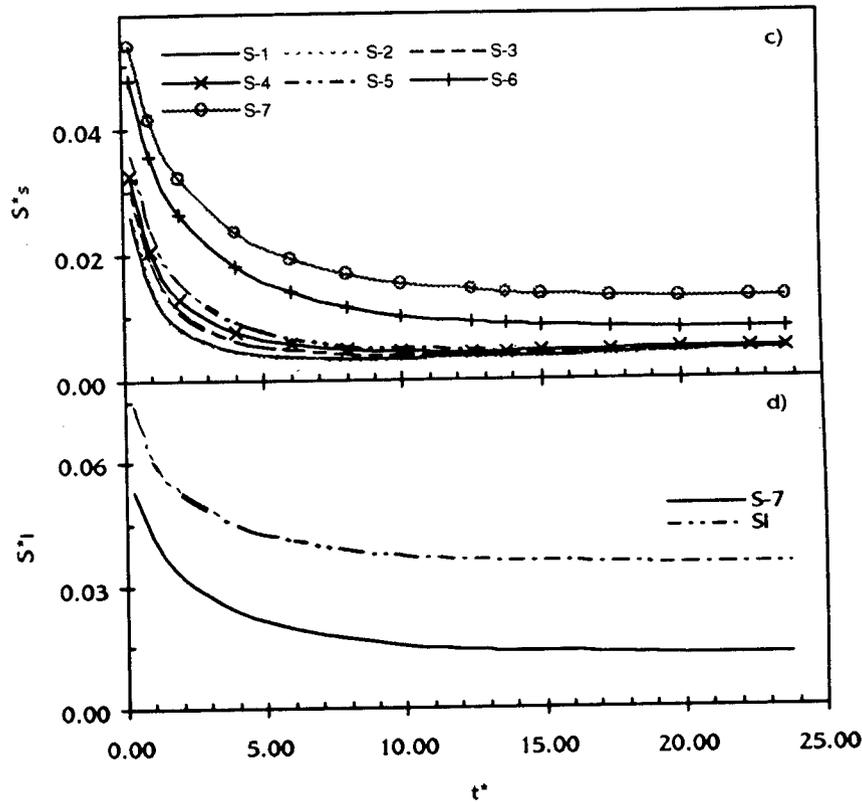
Por otro lado, los perfiles internos de oxígeno en la película son distintos a los externos debido a que los microorganismos presentan un mayor consumo de oxígeno al inicio y posteriormente los perfiles alcanzan un estado estacionario similar entre ellos. El mayor consumo de oxígeno es consecuencia de las condiciones bajo las cuales se inició la simulación; estas condiciones son arbitrarias y son usadas unicamente para lograr una mejor aproximación para conocer el estado estacionario. El oxígeno que se consume en el estado estacionario es equivalente a mantener condiciones aerobias en todo el volumen de la película, (Figuras 4.1b y 4.2b).

Los puntos 6 y 7 alcanzan un valor en la concentración de oxígeno distinto, con respecto a las interiores porque los microorganismos en ese volumen de película tienen una actividad metabólica diferente, además de que para esas capas es más fácil suplirse de oxígeno puesto que están en contacto con el mismo en la fase líquida. El oxígeno requerido para cubrir las funciones metabólicas de los microorganismos en la película es

mayor para el caso 1 (Flujo de alimentación: $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$) porque la cantidad de sustrato que tienen que degradar los microorganismos es mayor que para el caso 2, es por eso que se observa un mayor consumo de oxígeno en la fase sólida, esto también se refleja en que los perfiles de oxígeno en las fases gas y líquida sean menores para el caso 1.

Una de las limitaciones más importantes en el crecimiento de los microorganismos en los diferentes puntos de la película es la concentración de sustrato. En este caso hay gradientes de sustrato apreciables en la interfase líquido-sólido (punto 7), a la capa más interna, (punto 1), (Figuras 4.1c y 4.2c).

CASO 1

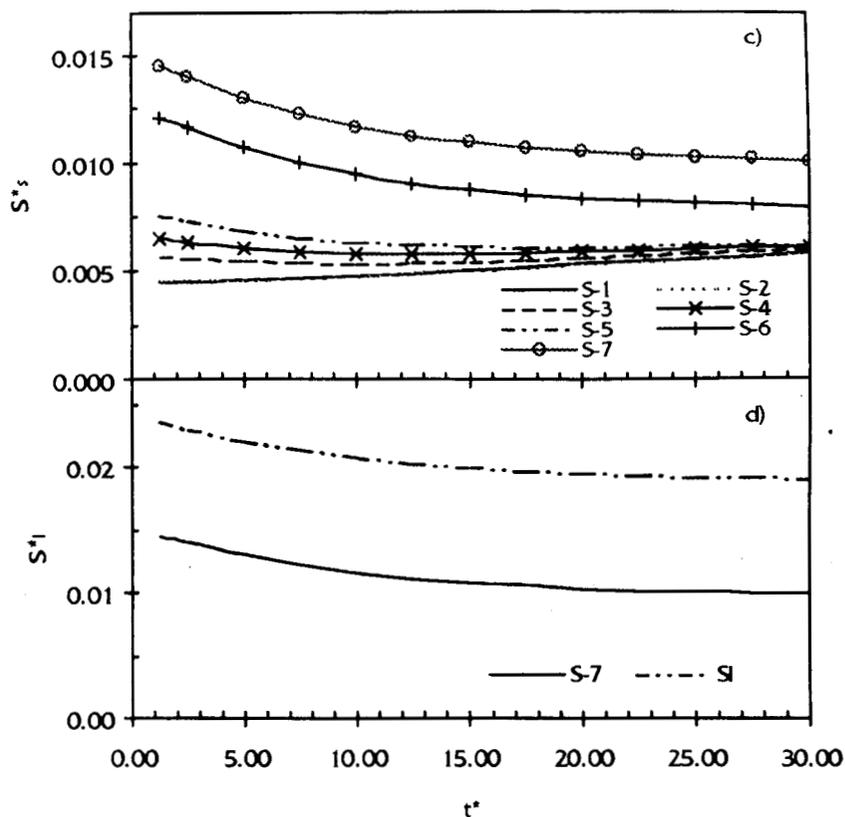


Figuras 4.1 Concentración de sustrato c) en la película, d) en el líquido y la interfase líquido-sólido.

En las Figuras 4.1d y 4.2d se representa la formación de una película líquida de sustrato que rodea a la biomasa la cual es una resistencia importante a vencer por el

mismo sustrato para llegar a las capas más internas de microorganismos, esta resistencia se explica en el capítulo 2 de este trabajo.

CASO 2



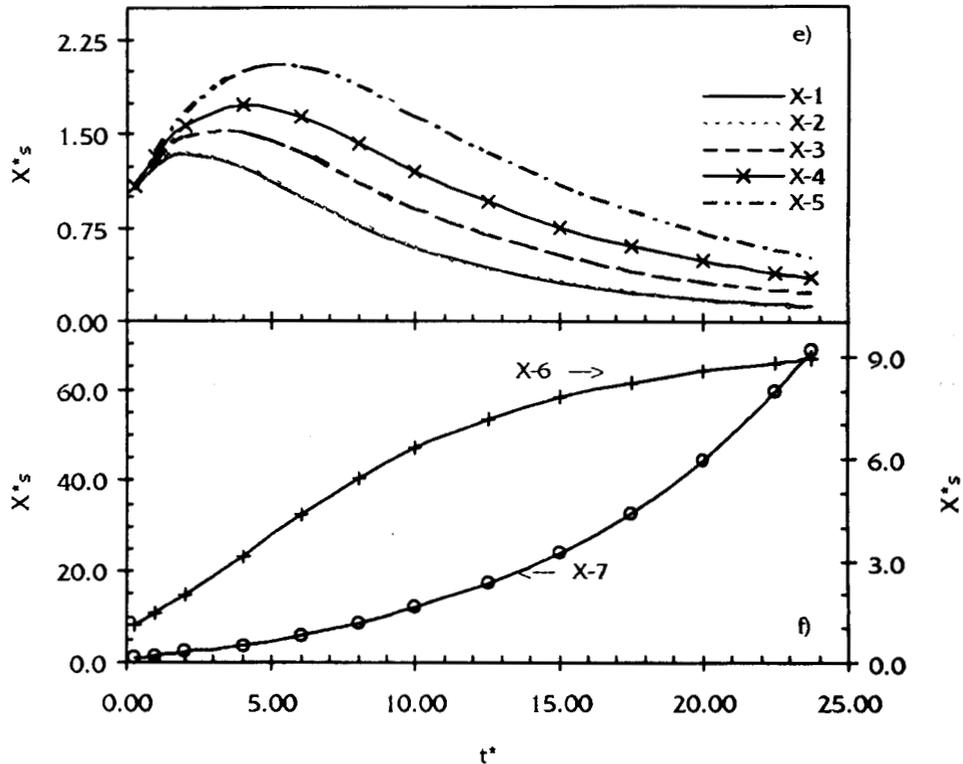
Figuras 4.2 Concentración de sustrato c) en la película, d) en el líquido y la interfase líquido-sólido.

Es importante señalar que el grosor de las capas es similar en ambos casos, esto es consecuencia de los parámetros de transporte utilizados. Para estas simulaciones el coeficiente de transporte en el líquido es el mismo para los dos casos de estudio.

Para la biomasa, en los puntos más internos de la película, los microorganismos (1-5) empiezan a disminuir su concentración como consecuencia de la falta de sustrato (Figuras 4.1e y 4.2e). Dado que no existe suficiente sustrato en ese volumen de película, los microorganismos usan sus propias sustancias celulares (metabolismo endógeno), para seguir manteniéndose, y poder realizar sus funciones metabólicas, causando una disminución en la concentración de biomasa.

Aunque se prediga la existencia de un aumento en la concentración de biomasa en las capas externas 6 y 7 (Figuras 4.1f y 4.2f), sólo un espesor de la película es activo, es decir, la concentración promedio de microorganismos permanece constante como consecuencia del metabolismo endógeno de las capas interiores.

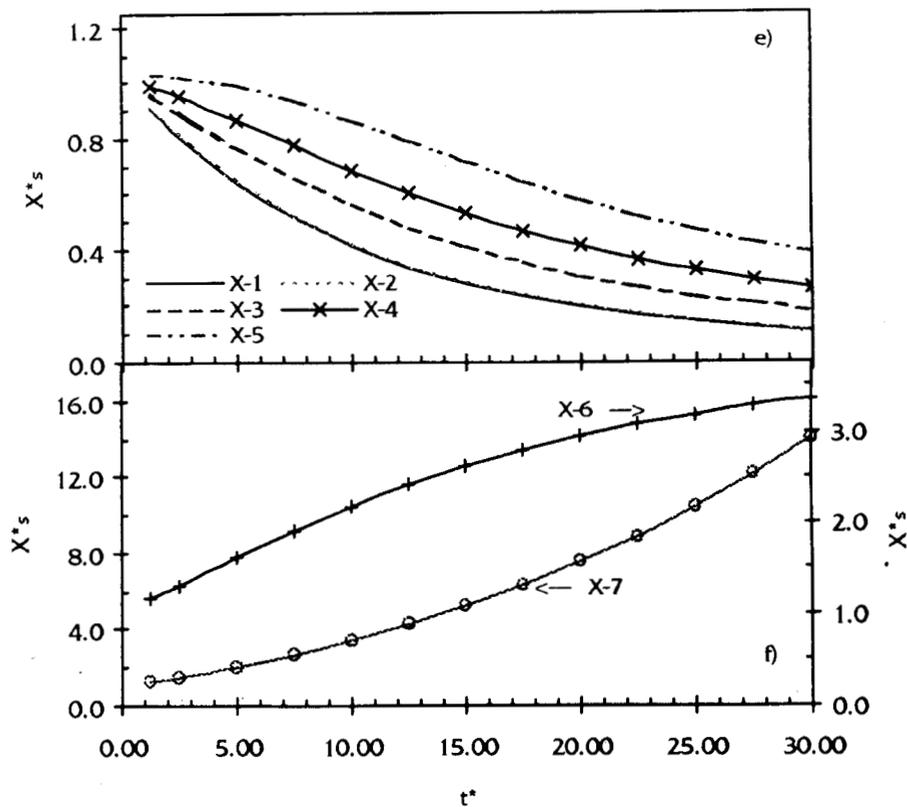
CASO 1



Figuras 4.1 Perfiles de concentración de microorganismos e) puntos 1-5), f) puntos 6-7.

El aumento en la concentración de biomasa en los puntos 6 y 7 de la película es continuo, si la alimentación del sustrato al reactor es constante; de tal forma que siempre existen nutrientes acumulados en la capa líquida que rodea a los microorganismos, facilitando el transporte de sustrato a las capas externas de la película (Bailey y Ollis, 1986). En estos puntos la inhibición de los microorganismos por sustrato no se cumple porque ésta sólo sucede cuando la concentración de sustrato es superior a la que puede tolerar la biomasa.

CASO 2

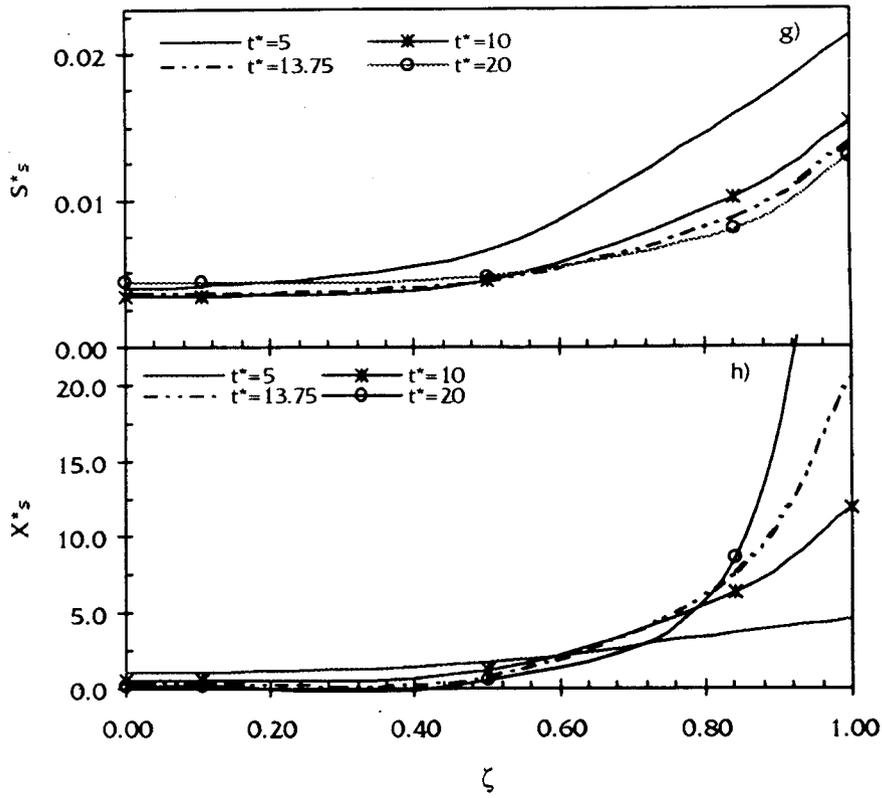


Figuras 4.2 Perfiles de concentración de microorganismos e) puntos 1-5), f) puntos 6-7.

Los microorganismos cerca de la superficie donde la concentración de sustrato es alta están en una fase de crecimiento acelerado (Figuras 4.1f y 4.2f), mientras que los microorganismos que están cerca del soporte realizan metabolismo endógeno, lo cual provoca una disminución en su concentración (Figuras 4.1e y 4.2e), esto se debe a que la concentración de sustrato en esas capas no es la suficiente para que los microorganismos puedan realizar sus funciones metabólicas. El metabolismo endógeno está representado en el modelo por la constante k_{ch} , su valor se eligió a partir de valores encontrados en la literatura.

En las Figuras 4.1g y 4.2g así como en 4.1h y 4.2h se presentan los perfiles de concentración para el sustrato y la biomasa respectivamente para diferentes tiempos de operación del reactor.

CASO 1



Figuras 4.1 Perfiles de concentración en la película g) sustrato, h) microorganismos.

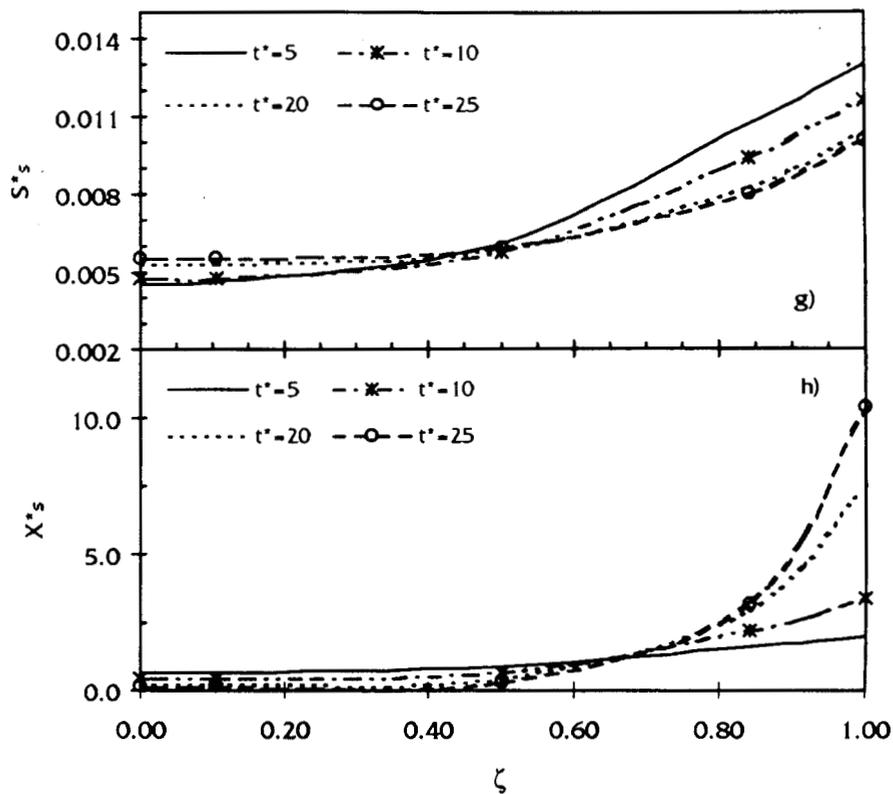
Los perfiles de concentración tanto para el sustrato como para la biomasa son planos para puntos internos (1-5), mientras que en los puntos 6 y 7 al existir sustrato acumulado en la región que rodea a los microorganismos, éstos mantienen perfiles de crecimiento continuo. Es decir, los microorganismos de las capas (1-5) se encuentran limitados principalmente en su crecimiento por la concentración de sustrato, de tal forma que realizan sus funciones metabólicas por medio del mantenimiento endógeno, tal como lo indica la cinética de crecimiento definida por (3.22b).

En las Figuras 4.1h y 4.2h conforme el tiempo avanza la concentración de biomasa aumenta, a partir del tiempo $t^*=10$ los perfiles en los puntos más internos son planos, mientras que los puntos externos continúan aumentando su concentración, esto

es consecuencia de los perfiles planos en la concentración del sustrato en los puntos internos, por lo que la concentración de microorganismos es constante.

En las Figuras 4.1h y 4.2h es evidente que no todo el espesor de la película está activo, sólo el intervalo que va de $\zeta = 0.60$ a 1.0 está activo, si la película tiene un espesor de 150 μm esto implica que el grosor activo es de 60 μm , como lo es para los dos casos que se presentan. Experimentalmente se han reportado espesores de película activos del orden de 60 a 100 μm (Skowlund, 1990; Freitas dos Santos y Livingston, 1995).

CASO 2



Figuras 4.2 Perfiles de concentración en la película g) sustrato, h) microorganismos.

En las Figuras 4.1i y 4.2i se muestra la concentración promedio del sustrato y la de microorganismos en la película. La forma de cálculo de esta concentración promedio se explica en el apéndice A. En estas gráficas se puede observar que se ha alcanzado un estado estacionario tanto para el sustrato como para la biomasa, para ambos flujos de

alimentación. Es interesante notar que el comportamiento cualitativo de la capa 6 de microorganismos (Figs. 4.1f y 4.2f) es igual al presentado en las Figuras 4.1i y 4.2i, lo que confirma el hecho de tener un espesor activo y por ende una concentración de microorganismos fija o bien en estado estacionario para la película.

CASO 1

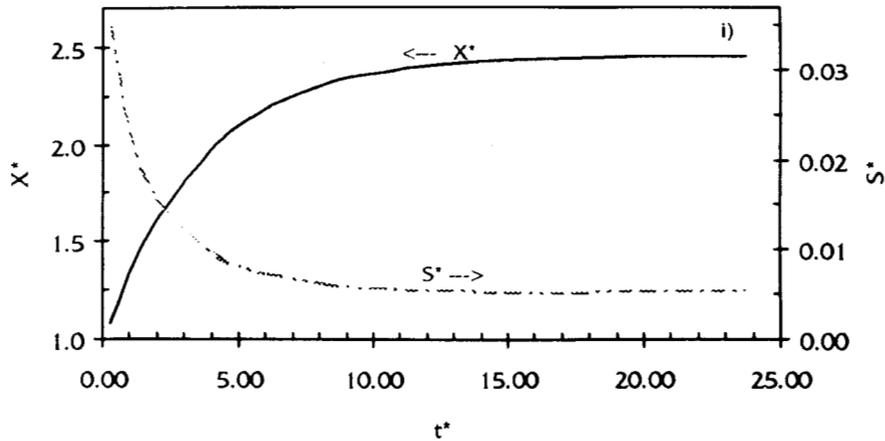


Figura 4.1i Concentración promedio de sustrato y de microorganismos en la película.

CASO 2

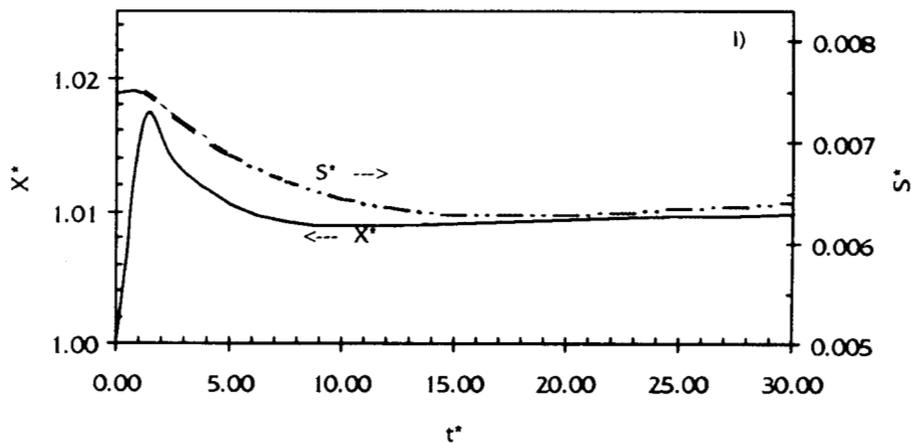


Figura 4.2i Concentración promedio de sustrato y de microorganismos en la película.

La diferencia más notable entre los dos flujos de alimentación es que los cambios en la concentración de biomasa son más rápidos para el caso 2. Los microorganismos (Figura 4.2i) alcanzan una concentración promedio máxima, resultado de la degradación

del sustrato, posteriormente la biomasa alcanza un estado estacionario con una concentración menor con respecto al caso 1 y esto es porque el flujo de alimentación del líquido es menor, aunque la concentración de sustrato alimentado para ambos casos sea la misma. La limitación en el crecimiento de los microorganismos se debe principalmente a la disminución del contacto entre el líquido y la película, para el caso 2 el flujo de alimentación de sustrato es menor, es decir, la cantidad de sustrato a degradar es menor que para el caso 1, por lo tanto el crecimiento de microorganismos para el caso 2 es menor (Bailey y Ollis, 1986).

El número de Biot para ambos casos indica que las resistencias interna y externa de transporte de masa son importantes (casos 1 y 2: $Bi_{O_2} = 3.558$, $Bi_S = 2.757$), de tal forma que las dos resistencias limitan al transporte de masa del sustrato y oxígeno. Es por eso que se forma una capa de líquido que rodea a la biomasa y la difusión de sustrato se dificulta al interior de la película.

Los estados estacionarios se eligieron cuando los cambios en la concentración de oxígeno en las tres fases, del sustrato en el líquido y en la película y de los microorganismos cumplen la tolerancia específica (1×10^{-7}) con respecto al tiempo (Figuras 4.1a, 4.2a, 4.1b, 4.2b, 4.1i y 4.2i). Para el caso 1, el estado estacionario se eligió en el tiempo adimensional de $\hat{t} = 13.75$, equivalente a 23.4 horas; para el caso 2 en el tiempo adimensional de $\hat{t} = 20.0$, equivalente a 34 horas.

4.4 Cambio en la Concentración de Alimentación del Sustrato

4.4.1 Validación del Modelo Matemático para Cambios en la Concentración de Alimentación del Sustrato

Para validar el modelo matemático propuesto se realizaron cambios bruscos en la concentración de alimentación del sustrato, además de estudiar el efecto de tales cambios en las especies presentes en las tres fases del reactor. La validación del modelo matemático se realizó para los dos flujos de alimentación de referencia.

Cuando se estimula al sistema con una perturbación tipo escalón en la concentración de alimentación del sustrato existen dos respuestas posibles ante tal perturbación. La primera respuesta consiste en que el sistema asimile los cambios realizados, alcanzando un estado estacionario estable que permita que los microorganismos continúen degradando la nueva concentración del sustrato alimentado. La segunda respuesta sucede cuando el sistema de microorganismos no es capaz de degradar al sustrato como consecuencia de la inhibición causada por un incremento en el mismo. Es decir, la película biológica se inhibe por completo siendo incapaz de asimilar el cambio y cesando toda degradación.

Para el modelo matemático, el escalón alimentado se realizó a partir del estado estacionario que se encontró por medio de las simulaciones. Es importante señalar que el valor del estado estacionario obtenido por las simulaciones no es igual al experimental, debido a que la predicción de aquel es resultado de un conjunto de parámetros, los cuales están fuertemente ligados a los parámetros cinéticos y biológicos del sistema de microorganismos, y que no en todos los casos son iguales a los coeficientes que se hubieran podido conocer de los experimentos de Chávez-Rivera (1994).

La diferencia principal entre los estados estacionarios experimentales y los simulados radica en que el sistema real de microorganismos sufre la influencia de factores externos tales como cambios en la temperatura, y condiciones de mezclado que no se consideran en el desarrollo del modelo matemático, en este trabajo.

En la Figura 4.3 se presenta el escalón en la concentración de alimentación del sustrato de $S_{LE}=100$ a 250mg/l con un flujo de alimentación de $1.036 \times 10^{-7} \text{m}^3 \text{s}^{-1}$; los parámetros utilizados se presentan en el apéndice B (Tablas B1, B2).

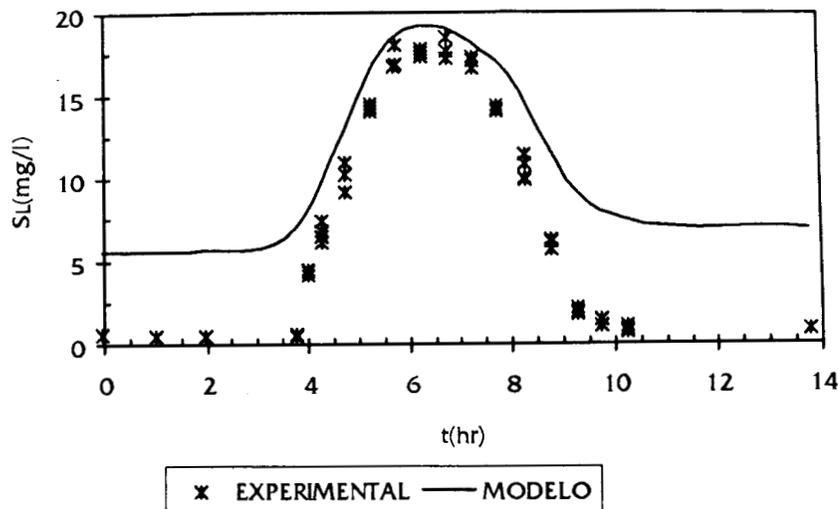


Figura 4.3 Validación del modelo matemático.

El modelo matemático predice cualitativamente los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994). La comparación de los datos generados por el modelo para los escalones en la concentración de alimentación del sustrato se hizo a partir del estado estacionario encontrado por el modelo, por lo que se observan diferencias cuantitativas en lo que se refiere al estado estacionario experimental. Este desfase entre los estados estacionarios experimentales y los generados por el modelo podría explicarse en función de las propiedades de los microorganismos a adaptarse de mejor forma a los escalones y tener concentraciones de sustrato menores a las encontradas por el modelo que no describe la evolución de los microorganismos a cambios en las condiciones de operación.

La tendencia ante una perturbación en la alimentación del sustrato es casi idéntica, alcanzando un máximo para una concentración de 20 mg/l comparada con los datos experimentales de 18 mg/l, lo cual no es una diferencia muy grande comparada con la concentración de alimentación del sustrato (250 mg/l). El modelo matemático propuesto obtiene un nuevo estado estacionario en un periodo de tiempo de 5.28 horas, mientras que los datos experimentales muestran que el estado estacionario se alcanzó después de 5.55 horas.

El coeficiente de correlación para los datos generados por el modelo matemático es de 0.87, lo cual significa que el modelo se aproxima adecuadamente a los datos

experimentales aun cuando el estado estacionario inicial en el cual se aplicó la perturbación es diferente al experimental.

En la Figura 4.4 se presenta el escalón en la concentración de alimentación del sustrato de $S_{LE}=100$ a 250mg/l con un flujo de alimentación de $4.2 \times 10^{-8} \text{m}^3 \text{s}^{-1}$; los parámetros utilizados se presentan en el apéndice B (Tablas B1, B3).

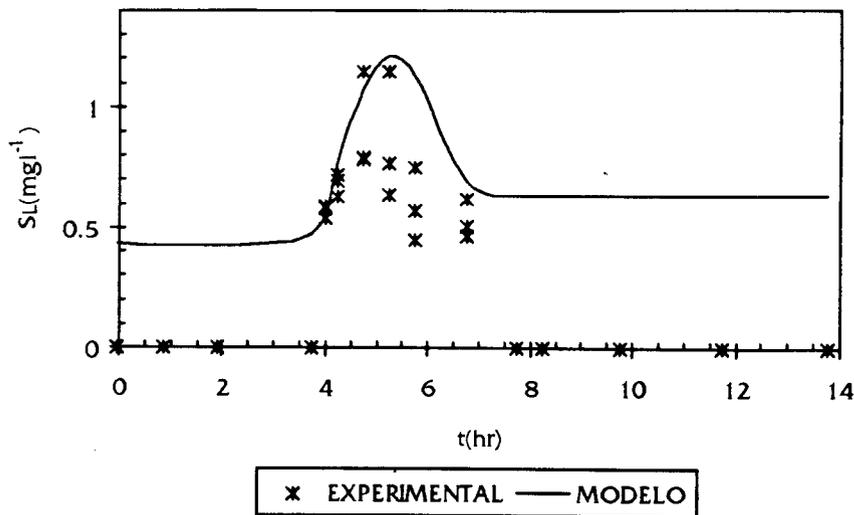


Figura 4.4 Validación del modelo matemático.

El modelo reproduce cualitativamente los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994) en base al conjunto de parámetros usados en las simulaciones. La tendencia que sigue la respuesta generada por el modelo matemático es similar a la de los datos experimentales, alcanzando su máximo efecto en 1.35 mg/l para los datos experimentales y de 1.4 mg/l para el modelo, lo cual no es una diferencia muy grande. Los microorganismos reaccionan aproximadamente en el mismo intervalo de tiempo, observándose una recuperación del sistema al alcanzar un nuevo estado estacionario. El estado estacionario que se alcanza por el modelo es diferente al experimental, esto se debe básicamente a que las condiciones experimentales son variables en cuanto a que algunas propiedades biológicas, y físicas de los microorganismos cambian constantemente, tal es el caso de la difusión del sustrato al interior de la película o bien a algún problema de mezclado que se haya presentado durante la realización de los experimentos.

El coeficiente de correlación para los datos generados por el modelo es de 0.80, lo cual indica que es una buena aproximación. El modelo matemático predice la recuperación del sistema, encontrando un estado estacionario que permite una degradación continua del sustrato. El tiempo de asimilación de los escalones alimentados es aproximadamente de 4.15 horas mientras que el experimental es de 2.77 hr.

La segunda respuesta esperada ante cambios tipo escalón en la concentración de alimentación del sustrato es cuando los microorganismos sufren inhibición por la alta concentración de sustrato alimentada. En la Figura 4.5 se presentan los perfiles para el sustrato en el líquido ante un cambio tipo escalón de $S_{LE}=100$ a 500mg/l para un flujo de alimentación de $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$.

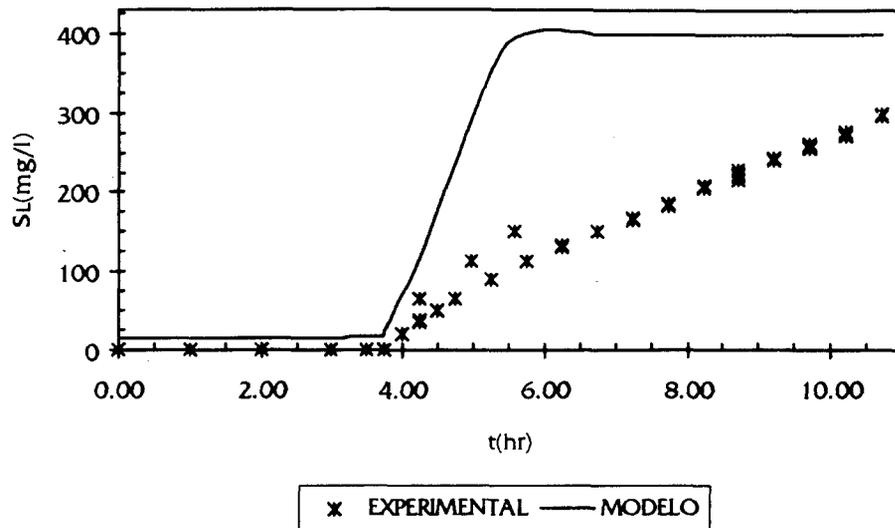


Figura 4.5 Validación del modelo matemático.

La respuesta generada por el modelo matemático a este escalón solo se puede comparar cualitativamente con los datos experimentales de Chávez-rivera (1994). El escalón se realizó para el mismo flujo de alimentación ($1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$), pero experimentalmente el escalón fue de $S_{LE}=100$ a 500 mg/l , mientras que para las simulaciones fue de $S_{LE}=100$ a 400 mg/l , para escalones de mayor magnitud, la respuesta del modelo matemático es idéntica. Nuevamente la causa de tal comportamiento es que el modelo matemático usa valores de parámetros fijos para las simulaciones, mientras que en los experimentos existen variaciones en las propiedades

de la biomasa que afectan fuertemente su respuesta, haciéndola más resistente a los escalones de concentración más altos.

4.4.2 Flujo de Alimentación: $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Con el objeto de estudiar el efecto que tiene el cambio en la concentración de alimentación del sustrato se realizaron cuatro escalones en la concentración de sustrato alimentado, los parámetros utilizados en la simulación se muestran en el apéndice B, (Tablas B.1 y B.2). De forma adimensional los escalones son los siguientes:

- Escalón 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$
- Escalón 2: $S_{LE}^* = 1.00-3.00$
- Escalón 3: $S_{LE}^* = 1.00-3.50$

A partir de un tiempo anterior al estado estacionario (el cual se considerará como el tiempo cero $t^*=0$, para efectos de simulación) se aplicó un escalón en la concentración de alimentación de sustrato, en el tiempo $t^*=3.75$ (tiempo adimensional). Ninguna de las condiciones de operación (concentración de alimentación de oxígeno, flujo de alimentación del aire y del líquido), a partir de las cuales se encontró el estado estacionario se variaron. Es importante señalar que en las figuras se muestra un periodo de tiempo anterior al cual se alimentaron los escalones.

En la Figura 4.6a se presentan los perfiles del sustrato en el líquido para los tres escalones citados. La magnitud del cambio observado en la concentración del sustrato es dependiente de la magnitud del escalón alimentado. En todos los casos la concentración de microorganismos en el sistema fue capaz de degradar los cambios en la concentración del sustrato alimentado.

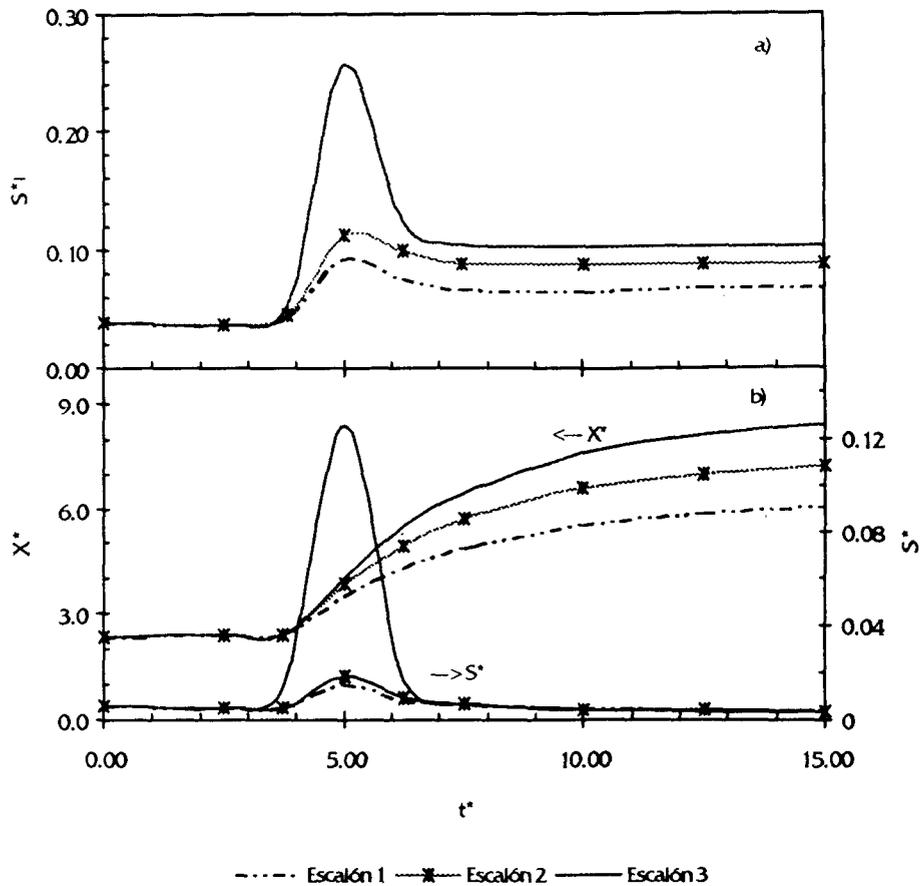
La dinámica del sistema depende de la magnitud del cambio realizado, siendo menor el tiempo de degradación para un escalón menor y mayor para un escalón de concentración de sustrato mayor. Para el escalón 1 de $S_{LE}^*=2.50$, el intervalo de tiempo para alcanzar un nuevo estado estacionario en la concentración del sustrato en la fase líquida es de 3.00 unidades de tiempo adimensional, o sea 5.28 horas de operación real, para el escalón 2 de $S_{LE}^*=3.00$ el intervalo es de 3.25 unidades de tiempo

adimensional, o sea 5.52 horas y para el escalón 3 de $S_{LE}^* = 3.50$ el intervalo es de 3.50 unidades de tiempo adimensional, o sea 6.16 horas.

ESCALÓN 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$

ESCALÓN 2: $S_{LE}^* = 1.00-3.00$

ESCALÓN 3: $S_{LE}^* = 1.00-3.50$



*Figuras 4.6 a) Concentración del sustrato en la fase líquida.
b) Concentración promedio del sustrato y de la biomasa en la película.*

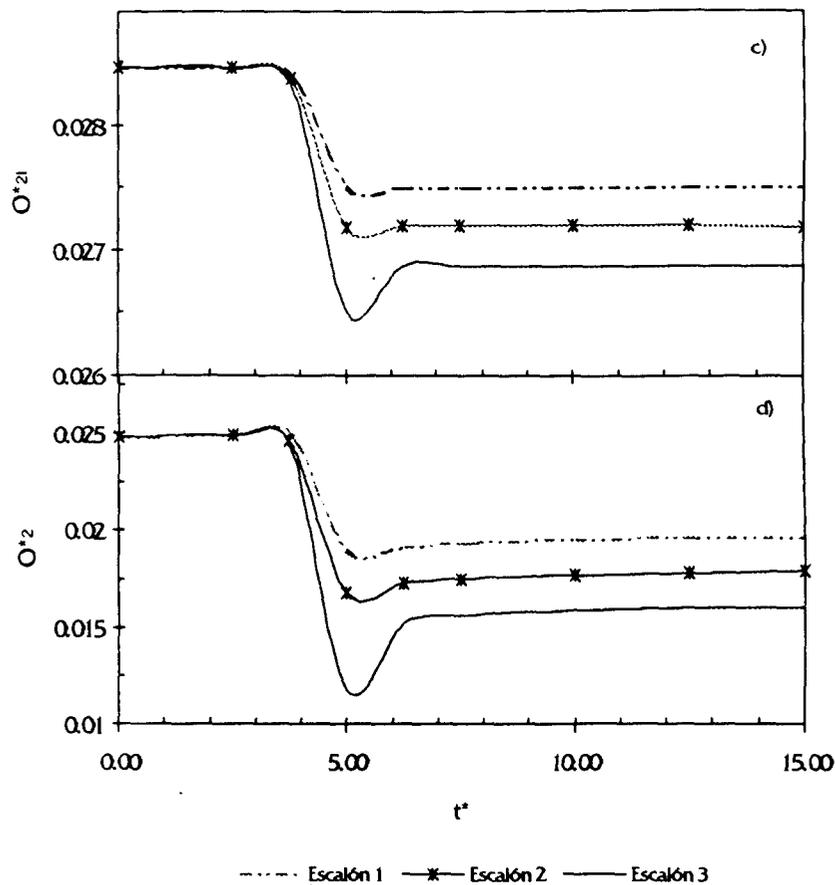
Para los tres escalones, el sustrato de la fase líquida alcanza un estado estacionario diferente al que tenía inicialmente (Fig. 4.6a). Es interesante notar que el nuevo estado estacionario es similar ante los tres escalones efectuados en un 96%, es decir, el sistema a partir de una perturbación de $S_{LE}^* = 1.00$ hasta $S_{LE}^* = 3.50$ sigue el mismo comportamiento dinámico obteniéndose un estado estacionario similar.

En la Figura 4.6b se presentan las concentraciones promedio del sustrato y de la biomasa en la película para los tres escalones efectuados, en este caso el sustrato alcanza su estado estacionario inicial, es decir el sistema es capaz de asimilar el cambio en la concentración de sustrato a expensas de un incremento en la biomasa. Al aplicar el escalón, la biomasa reacciona inmediatamente e inicia la degradación total del sustrato, aumentando su concentración. Esto implica obtener un valor de estado estacionario más alto que el inicial.

ESCALÓN 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$

ESCALÓN 2: $S_{LE}^* = 1.00-3.00$

ESCALÓN 3: $S_{LE}^* = 1.00-3.50$



Figuras 4.6 c) Concentración de oxígeno en el líquido.
d) Concentración promedio del oxígeno en la película.

Como una consecuencia de una mayor cantidad de sustrato alimentado, la biomasa tiene que consumir mas oxígeno para completar la oxidación del sustrato, de

esta forma se alcanza un estado estacionario diferente al inicial, para el oxígeno en las tres fases. Los perfiles de oxígeno que se presentan en las Figuras 4.6c y 4.6d dependen de la magnitud del escalón, implicando que un mayor consumo de oxígeno se requiera para una concentración mayor de sustrato presente en el reactor. El consumo de oxígeno en la película es proporcional al cambio en la concentración de sustrato alimentado, los microorganismos no sufren condiciones anaerobias puesto que siempre hay oxígeno disponible en el reactor, los nuevos estados estacionarios para el oxígeno en las tres fases del reactor son más bajos que los iniciales, lo cual es una respuesta esperada que reproduce satisfactoriamente el modelo.

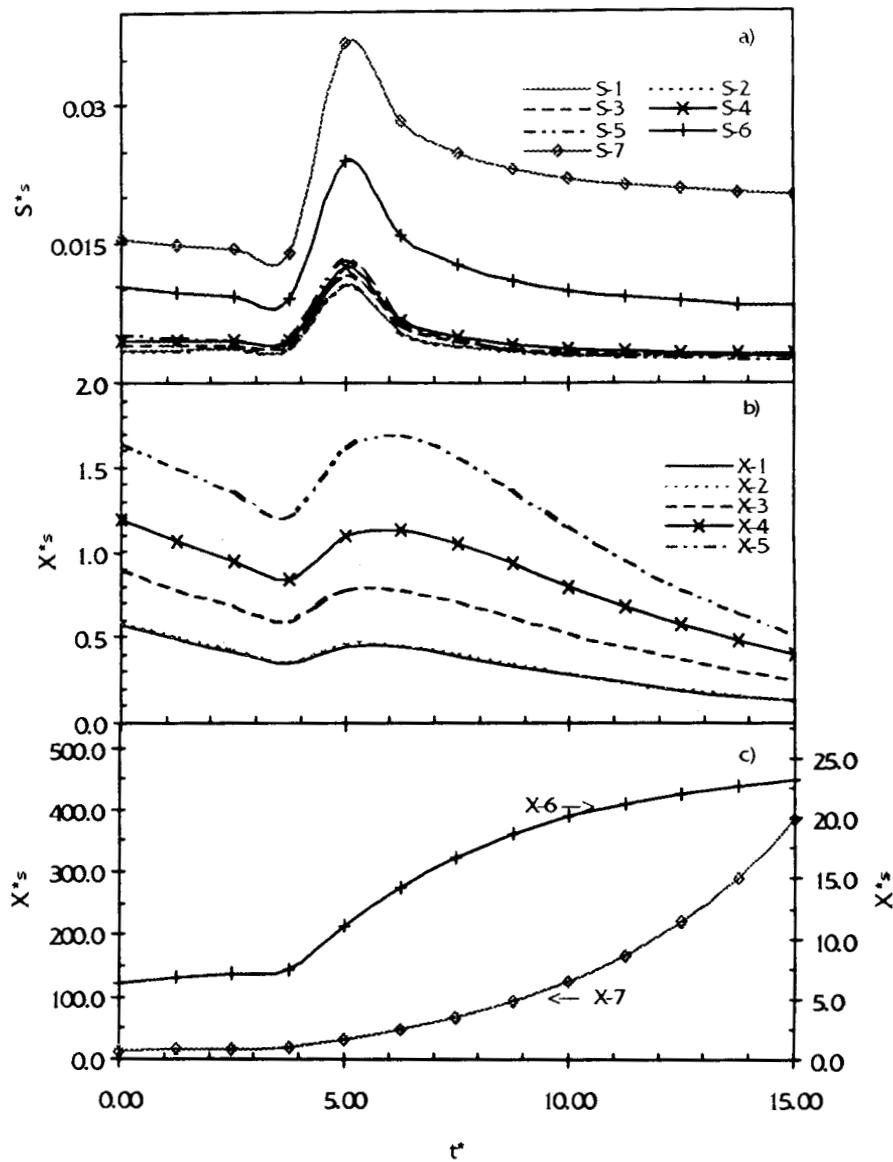
En la Figura 4.7a se observan los perfiles del sustrato en cada una de las capas que forman a la película, el comportamiento es el mismo para los tres escalones pero a modo de ilustración sólo se presenta el caso de $S_{LE}^* = 1.00-2.50$.

El gradiente de concentración del sustrato entre la última capa (interfase, punto 7) y el líquido es apreciable, por lo que se confirma la existencia de una capa de líquido estancada que cubre a la interfase líquido-sólido (Figuras 4.6a y 4.7a), la cual es una consecuencia de tomar en cuenta la resistencia a la transferencia de masa entre el líquido y el sólido. La capa líquida implica que la resistencia externa de transporte de masa es importante, tal como lo indica el número de Biot ($Bi_{O_2} = 3.558$, $Bi_S = 2.757$).

El cambio en la concentración de los microorganismos está representado en la Figura 4.7b (capas internas, 1-5), su comportamiento es interesante porque al no haber suficientes nutrientes disponibles, la biomasa empieza a consumir sus propias sustancias celulares para poder mantenerse, lo cual provoca una disminución en la concentración de la misma.

Es importante señalar que el estado estacionario de los microorganismos se eligió en base a la concentración promedio de la película, por lo que el escalón se aplicó aun cuando existían cambios en la concentración de microorganismos en las capas internas (Fig. 4.1i).

ESCALÓN 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$



Figuras 4.7 Concentración en la fase sólida. a) sustrato, b) microorganismos (puntos 1-5), c) microorganismos (puntos 6-7).

La capa 6 es la que representa el comportamiento cualitativo global de la película, aunque cuantitativamente no lo sea (Figs. 4.6b y 4.7c). El comportamiento para los puntos 6 y 7 está de acuerdo con otras hipótesis que han sido comprobadas y analizadas por diversos investigadores (Freitas dos Santos y Livingston, 1995; Skowlund, 1990; Wanner y Gujer, 1986). Por medio de modelos matemáticos y experimentos han encontrado que existe un crecimiento ilimitado de los

microorganismos, lo cual implica un aumento en el grosor de la película. Pero no todo el grosor está activo, es decir, existe un espesor constante que es activo y es el que realiza todas las funciones metabólicas requeridas para la degradación del afluente.

El comportamiento del último punto (7) de la película (Figura 4.7c) es una consecuencia del modelo planteado al no considerar un crecimiento en el espesor de la película, sino que éste se considera fijo. En el modelo el crecimiento de la película está representado con el aumento en la concentración de microorganismos en el punto 7 y como este punto no tiene volumen (puesto que la película no aumenta su espesor), todo el efecto de crecimiento se concentra en él.

- Escalón 4: $S_{LE}^* = 1.00-4.00$

Este caso es muy interesante porque se reproduce un estado estacionario diferente a los encontrados para los escalones 1, 2 y 3 (Figuras 4.8c y d). El fenómeno que sucede es la inhibición del crecimiento de los microorganismos presentes en el reactor, éstos al sufrir la inhibición por el sustrato ya no son capaces de seguir realizando sus funciones metabólicas.

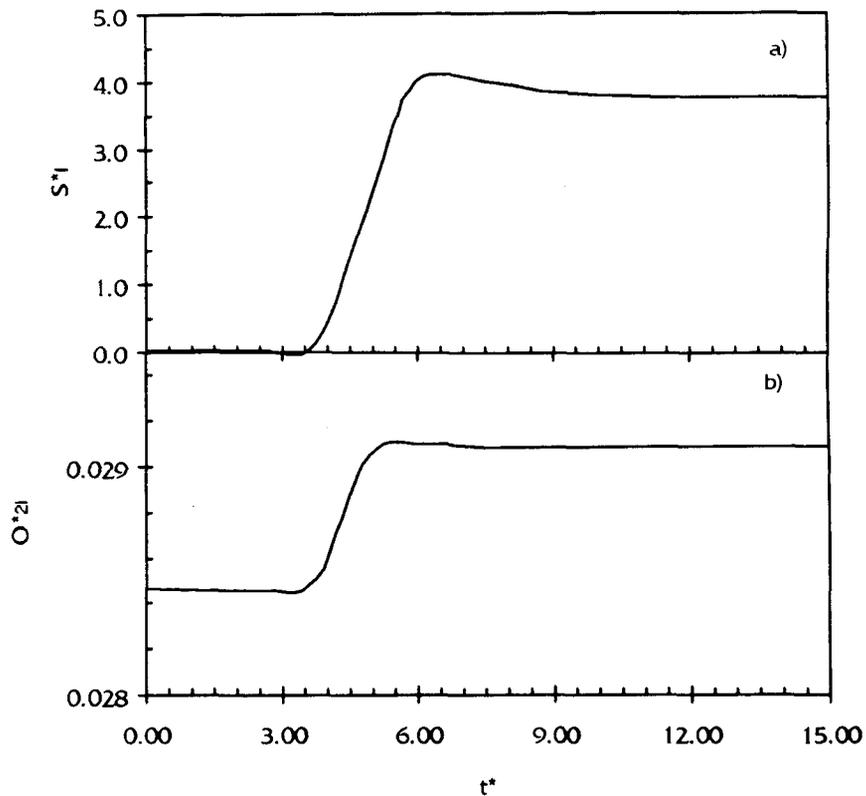
La inhibición por sustrato de los microorganismos se debe a que la concentración de sustrato alimentado es mayor a la que éstos pueden tolerar, este efecto se explica en el capítulo 2 en lo que se refiere a la cinética empleada en el modelo matemático.

Como todos los microorganismos del reactor se encuentran completamente inhibidos no existe reacción bioquímica en el reactor, por lo tanto la concentración de entrada y de salida son las mismas para el sustrato y el oxígeno en la fase líquida (Figuras 4.8a y b). Para el sustrato, la concentración es la de alimentación $S_{LE}^* = S_L^* = 4.00$; mientras que para el oxígeno se alcanza la concentración de solubilidad en el líquido.

Lo más importante del escalón realizado es la respuesta de los microorganismos del punto 7, el cual también se inhibe por la alta concentración del sustrato presente, lo que comprueba que el modelo predice el comportamiento del sustrato, oxígeno y biomasa dentro de los límites esperados. En la película se observa (Fig. 4.8e), que todos los microorganismos sufren inhibición a causa de la alta concentración de sustrato

alimentado, por lo que el nuevo estado estacionario representa la inhibición de toda la biomasa presente en el reactor.

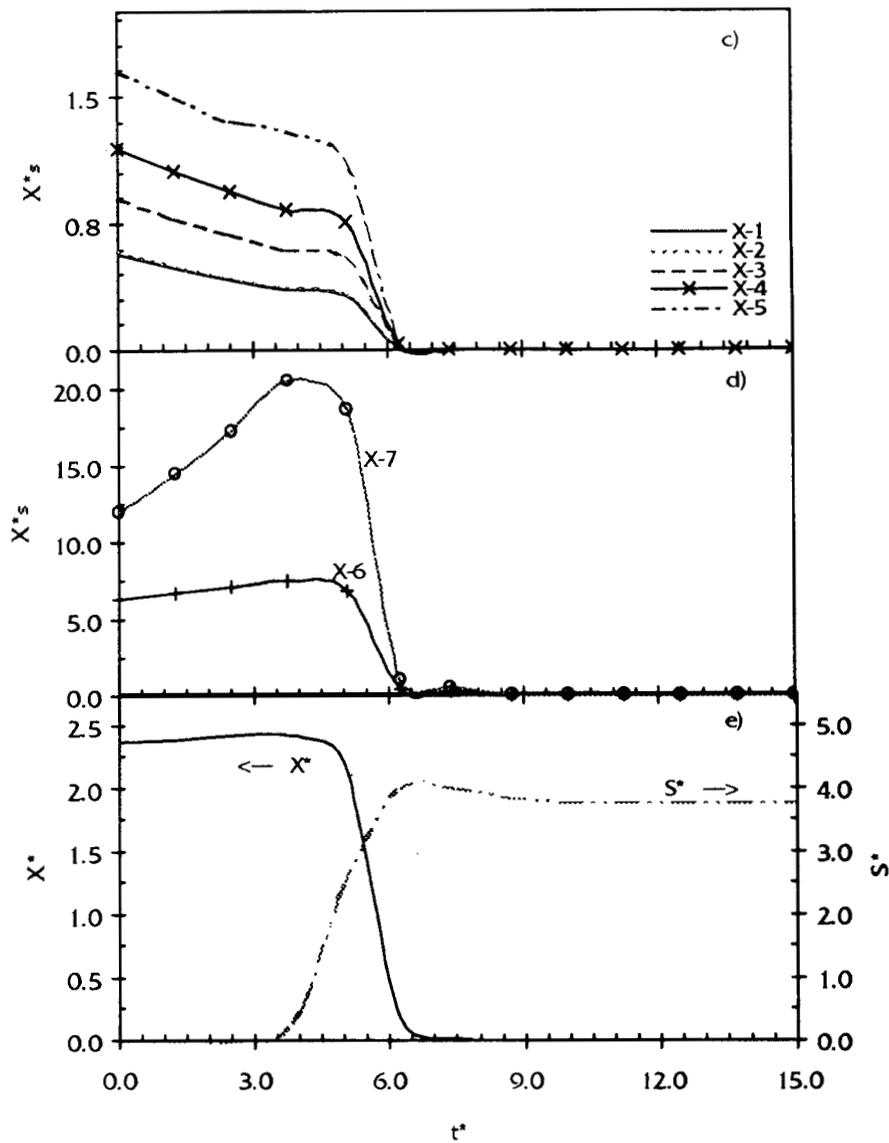
ESCALÓN 4: $S_{LE}^* = 1.00-4.00$



Figuras 4.8 Concentración en la fase líquida a) sustrato, b) oxígeno.

Es importante señalar que la concentración de la biomasa en los diferentes puntos de la película no se cruzan, en todos los puntos, la biomasa experimenta la misma intensidad de inhibición, al mismo tiempo ya que los procesos difusivos del interior de la película son más rápidos que el crecimiento. De esta forma, cuando se alimenta el escalón de sustrato las capas externas de microorganismos reaccionan a la concentración de sustrato después de un intervalo de tiempo, para después inhibirse por la alta concentración. Como en los puntos internos de la película hay concentraciones de sustrato mínimas, el gradiente de concentración es alto lo que permite que el sustrato se difunda al interior de la película, los microorganismos de esos puntos (1-5) tienen una pequeña recuperación aumentando su concentración.

ESCALÓN 4: $S_{LE}^- = 1.00-4.00$



Figuras 4.8 Concentración en la fase sólida c) biomasa puntos (1-5), d) biomasa puntos (6-7), e) promedio de sustrato y biomasa.

Debido a este gradiente de concentración en el sustrato, éste alcanza el máximo que inhibe a los microorganismos antes de que éstos tengan un crecimiento más notable, de tal forma que las curvas de crecimiento de los microorganismos de los puntos internos nunca se cruzan con las de los puntos externos.

Además, la cinética de crecimiento de los microorganismos no involucra un término de envenenamiento por sustrato, es decir, todo el sustrato que llega a la

película es aceptado por la biomasa para realizar sus funciones metabólicas. El modelo matemático propuesto contiene un término de inhibición por sustrato, el cual consiste en que si la concentración de sustrato es superior a una magnitud máxima que los microorganismos pueden tolerar sufrirán inhibición, más no envenenamiento:

Los estados estacionarios encontrados en esta simulación son comparables cualitativamente con los resultados experimentales de Chávez-Rivera (1994), en los que encuentra que, para una concentración mayor de $S_{LE}^* = 5.00$, el reactor no es capaz de asimilar el escalón alimentado. Este nuevo estado estacionario concuerda con el modelo planteado, el cual supone una concentración de sustrato máxima que los organismos pueden tolerar, arriba de esta concentración máxima los microorganismos sufren inhibición, lo cual provoca que se interrumpa el proceso de degradación del afluente.

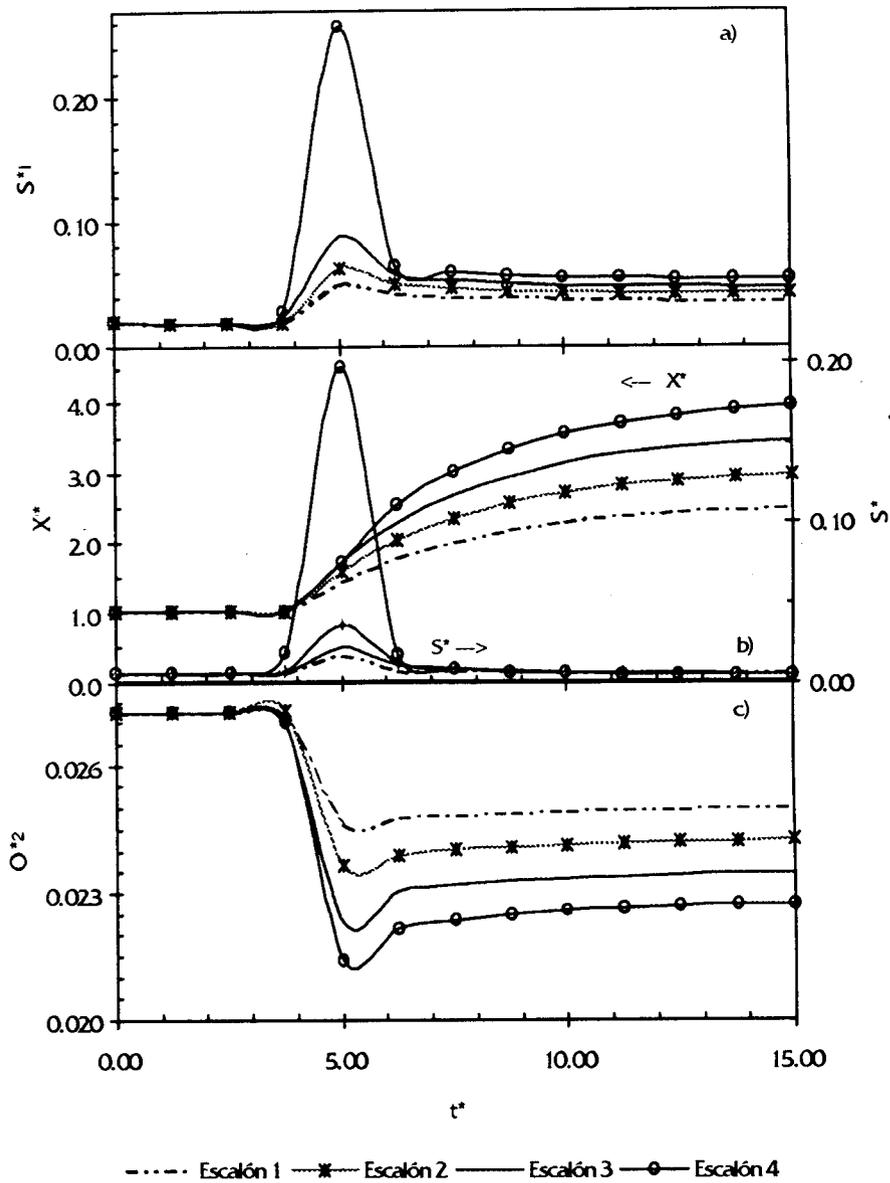
4.4.3 Flujo de Alimentación: $4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Se realizaron cinco escalones en la concentración de sustrato alimentado, para un mismo flujo de alimentación de sustrato; los parámetros utilizados en la simulación se muestran en el apéndice B, (Tablas B.1 y B.3). De forma adimensional:

- Escalón 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$
- Escalón 2: $S_{LE}^* = 1.00-3.00$
- Escalón 3: $S_{LE}^* = 1.00-3.50$
- Escalón 4: $S_{LE}^* = 1.00-4.00$

A partir de un tiempo anterior al estado estacionario, (el cual se considerará como el tiempo cero, $t^*=0.0$, para efectos de simulación), se perturbó al sistema con un escalón en la concentración de alimentación de sustrato, en el tiempo $t^*=3.75$, (tiempo adimensional). Ninguna de las condiciones de operación (concentración de alimentación de oxígeno, flujo de alimentación del aire y del líquido), a partir de las cuales se encontró el estado estacionario se variaron.

ESCALÓN 1: $S_{LE}^* = 1.00-2.50$
 ESCALÓN 2: $S_{LE}^* = 1.00-3.00$
 ESCALÓN 3: $S_{LE}^* = 1.00-3.50$
 ESCALÓN 4: $S_{LE}^* = 1.00-4.00$



Figuras 4.9 a) Concentración del sustrato en la fase líquida, b) Concentración promedio del sustrato y de la biomasa en la película, c) Concentración promedio del oxígeno en la película.

El comportamiento dinámico del sistema representado en las Figuras 4.9a, b y c, muestra que el sistema puede asimilar los cambios realizados en la alimentación del

sustrato, dependiendo de la magnitud del escalón. El nuevo estado estacionario que se alcanza para el sustrato en la fase líquida es un 0.1% mayor que el inicial (Figura 4.9a).

El tiempo que tarda el sistema en asimilar los cambios es de 2.36 unidades de tiempo adimensional, ($t= 4.15$ horas); de 2.5 unidades de tiempo adimensional ($t= 4.40$ horas); de 2.72 unidades de tiempo adimensional ($t= 4.78$ horas) y de 3.09 unidades de tiempo adimensional, ($t= 5.43$ horas) para los escalones $S_{LE}^* = 1.00-2.50$, $S_{LE}^* = 1.00-3.00$, $S_{LE}^* = 1.00-3.50$ y $S_{LE}^* = 1.00-4.00$ respectivamente. El tiempo de recuperación del sistema ante los escalones alimentados depende de la magnitud del cambio realizado.

En la Figura 4.9b se observa que el sustrato en la fase sólida alcanza el mismo estado estacionario inicial, de tal forma que al existir una mayor cantidad de nutrientes, los microorganismos aumentan su concentración en proporción a la magnitud del cambio.

El consumo de oxígeno en la película aumenta con la concentración de sustrato alimentado, por lo que el valor del estado estacionario final es más bajo que el inicial, el oxígeno presente en la película es suficiente para que los microorganismos nunca se encuentren en condiciones anaerobias y puedan oxidar todo el sustrato orgánico alimentado hasta en un 99% (Figura 4.9c).

- Escalón 5: $S_{LE}^* = 1.00-5.00$

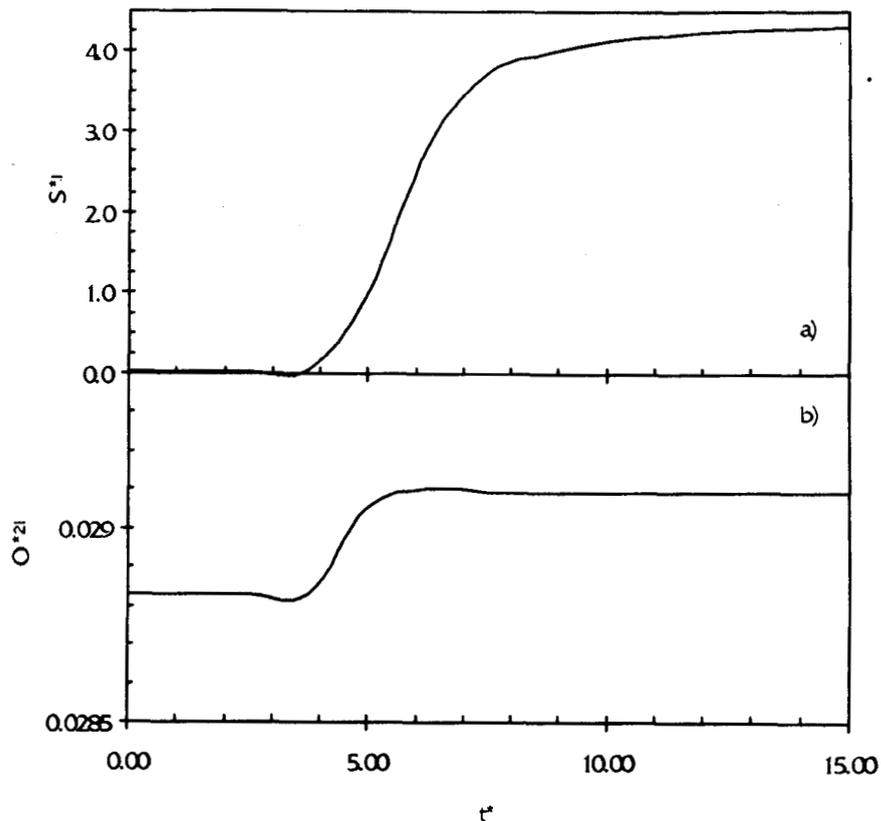
Con el fin de analizar la capacidad de asimilación del modelo, se alimentó un escalón de mayor magnitud. Para este escalón, el reactor ya no fue capaz de asimilar el cambio en la concentración de alimentación del sustrato, esto es porque el sustrato alcanza una concentración máxima que inhibe el crecimiento de la biomasa, provocando que todos los microorganismos presentes en el reactor no puedan seguir realizando sus funciones metabólicas (Fig. 4.10e), y se obtenga un estado estacionario diferente.

La concentración de salida en el líquido para el sustrato y oxígeno son iguales a las de alimentación (Fig. 4.10a y b); para el sustrato, la concentración es la del escalón $S_{LE}^* = S_L^* = 5.00$; mientras que para el oxígeno se alcanza la concentración de solubilidad

en el líquido. El resultado es el de un reactor en el que no existe ninguna reacción bioquímica (Figuras 4.10a, b, c, d, y e).

Una observación importante es que todas las capas de microorganismos que conforman la película se inhiben, (siguen el mismo comportamiento dinámico), lo cual quiere decir que el modelo representa satisfactoriamente el escalón efectuado (Figuras 4.10c y d). En la Figura 4.10e se observa, que todos los microorganismos sufren inhibición a causa de la alta concentración de sustrato alimentado, por lo que el nuevo estado estacionario representa la inhibición de toda la biomasa presente en el reactor.

ESCALÓN 5: $S_{LE}^* = 1.00-5.00$

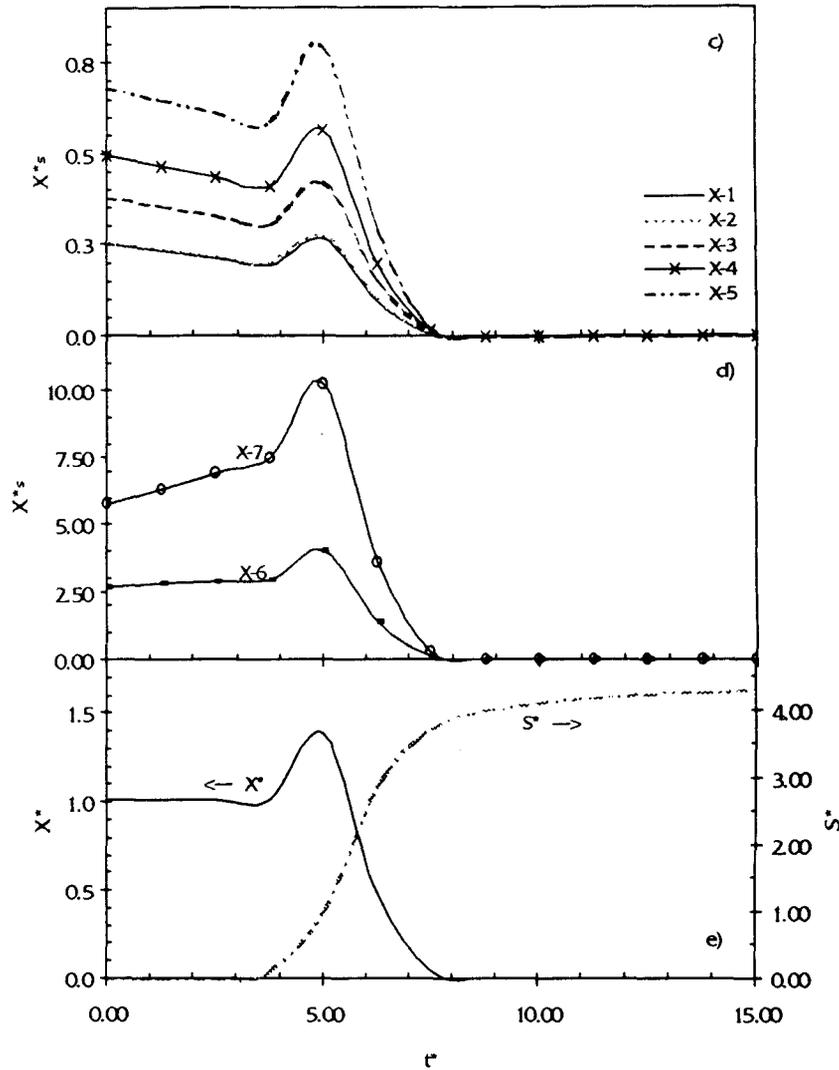


Figuras 4.10 Concentración en el líquido a) sustrato, b) oxígeno.

Dado el conjunto de variables alimentados al modelo, el estado estacionario que se alcanza para este escalón, no reproduce el reportado experimentalmente por Chávez-Rivera (1994), el cual permite que el sistema continúe la degradación de la corriente líquida sin que la biomasa se inhiba, mientras que el modelo propuesto

reproduce la inhibición del crecimiento de toda la biomasa presente en el reactor. La diferencia entre la magnitud del escalón experimental y la del modelo matemático podría deberse a que el modelo ussa valores de parámetros fijos, mientras que en los experimentos existen variaciones en las propiedades de la biomasa que afectan fuertemente su respuesta, haciendola más resistente a los escalones de concentración más altos.

ESCALÓN 5: $S_{LE}^* = 1.00-5.00$



Figuras 4.10 Concentración en la fase sólida c) microorganismos en los puntos (1-5), d) microorganismos en los puntos (6-7), e) Concentración promedio del sustrato y biomasa en la película.

Para comprobar la capacidad de predicción del modelo y la adaptabilidad de los microorganismos a escalones de concentración de alimentación de sustrato más altas se realizaron tres escalones, a partir del estado estacionario encontrado para el escalón 1 ($S_{LE}^* = 1.00-2.50$, Flujo de alimentación = $4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$). Los nuevos escalones se aplicaron en el tiempo $t^* = 13.75$, en la alimentación del sustrato en la corriente líquida:

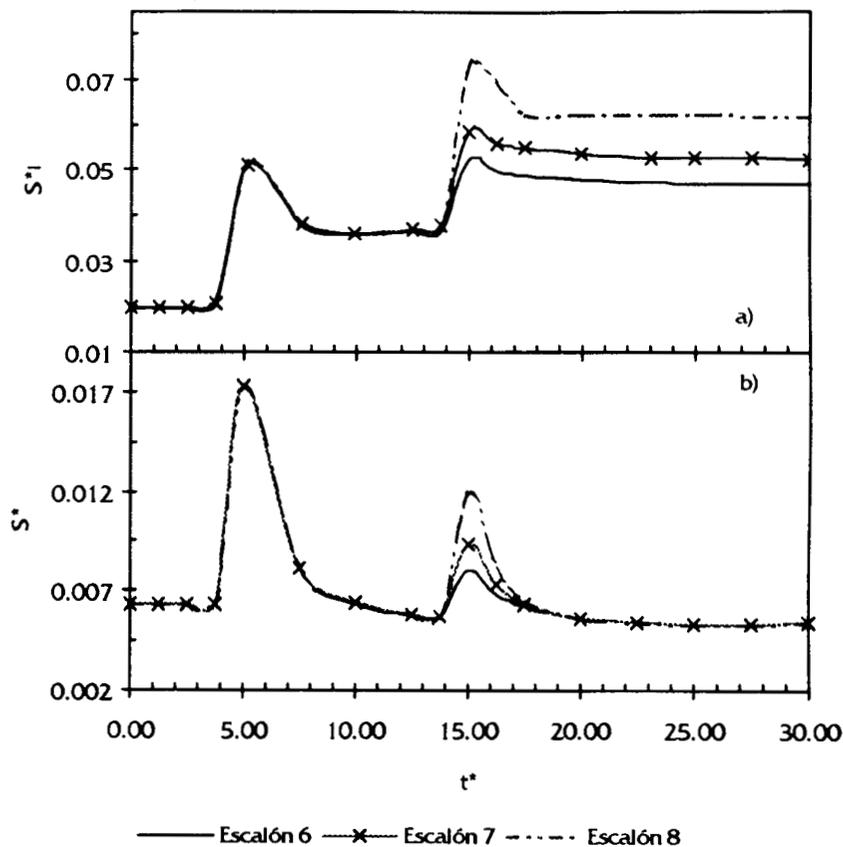
- Escalón 6: $S_{LE}^* = 2.50-3.50$
- Escalón 7: $S_{LE}^* = 2.50-4.00$
- Escalón 8: $S_{LE}^* = 2.50-5.00$

Los nuevos estados estacionarios que se alcanzaron en las distintas fases del reactor se presentan en las Figuras 4.11 a, b, c, y d.

ESCALÓN 6: $S_{LE}^* = 2.50-3.50$

ESCALÓN 7: $S_{LE}^* = 2.50-4.00$

ESCALÓN 8: $S_{LE}^* = 2.50-5.00$



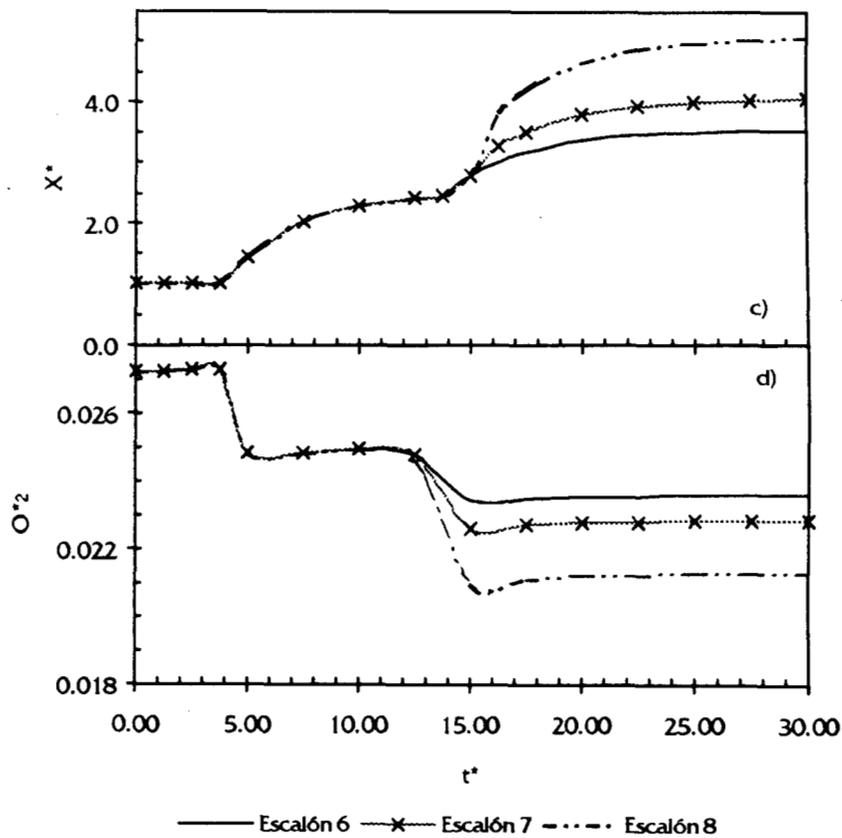
Figuras 4.11 a) Concentración del sustrato en la fase líquida, b) concentración promedio del sustrato en la película.

Los estados estacionarios son dependientes de la magnitud del escalón realizado, lo más importante es que los microorganismos ya están "habituados" a soportar una mayor concentración de sustrato, porque la concentración de alimentación a partir de la cual se aplicaron los escalones es de $S_{LE}^* = 2.50$. El sistema logra asimilar fácilmente los escalones, aun para una concentración de $S_{LE}^* = 5.00$, la respuesta es diferente comparada con el escalón 5, en el cual el sistema ya no asimiló el cambio, esto es una consecuencia de la concentración de microorganismos presentes en el momento en que se efectuaron los escalones (Figura 4.10a). La concentración de microorganismos es mayor comparada con la concentración a partir de la cual se efectuó el escalón de $S_{LE}^* = 1.00-2.50$.

ESCALÓN 6: $S_{LE}^* = 2.50-3.50$

ESCALÓN 7: $S_{LE}^* = 2.50-4.00$

ESCALÓN 8: $S_{LE}^* = 2.50-5.00$



Figuras 4.11 Concentración promedio en la fase sólida a) microorganismos, b) oxígeno

El sustrato en la fase sólida (Figura 4.11b) alcanza el estado estacionario que tenía inicialmente a expensas de un aumento en la concentración de la biomasa. En la Figura 4.11c se muestra la concentración promedio de microorganismos en la película, el nuevo estado estacionario depende de la magnitud de la concentración de sustrato alimentado, los microorganismos van a aumentar su concentración en forma proporcional al escalón y de esta forma poder asimilar el cambio realizado, permitiendo que la biomasa continúe la degradación del afluente.

La Figura 4.11d muestra las diferentes respuestas del oxígeno en la película (concentración promedio); el comportamiento dinámico es el esperado, el mayor consumo de oxígeno es debido a que los microorganismos necesitan más oxígeno para oxidar el sustrato alimentado al reactor.

Los estados estacionarios encontrados por el modelo matemático son cualitativamente similares a los resultados experimentales de Chávez-Rivera (1994), ver Figura 4.4. En todos los casos, el sistema de microorganismos puede asimilar los escalones alimentados.

4.5 Cambio en el Flujo de Alimentación

4.5.1 Validación del Modelo Matemático para Cambios en el Flujo de Alimentación

Se analizaron distintos casos aumentando el flujo de alimentación, es decir, reduciendo el tiempo de residencia del afluente en el reactor. El único caso que se presentará es el que se realizó a partir de una concentración de alimentación de sustrato de $S_{LE}^* = 2.50$ y un flujo inicial de $F_I = 4.2 \times 10^{-8}$ a $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$; los parámetros utilizados se presentan en el apéndice B (Tablas B.1 y B.3). El resto de los casos simulados no se presentan porque siguen un comportamiento similar.

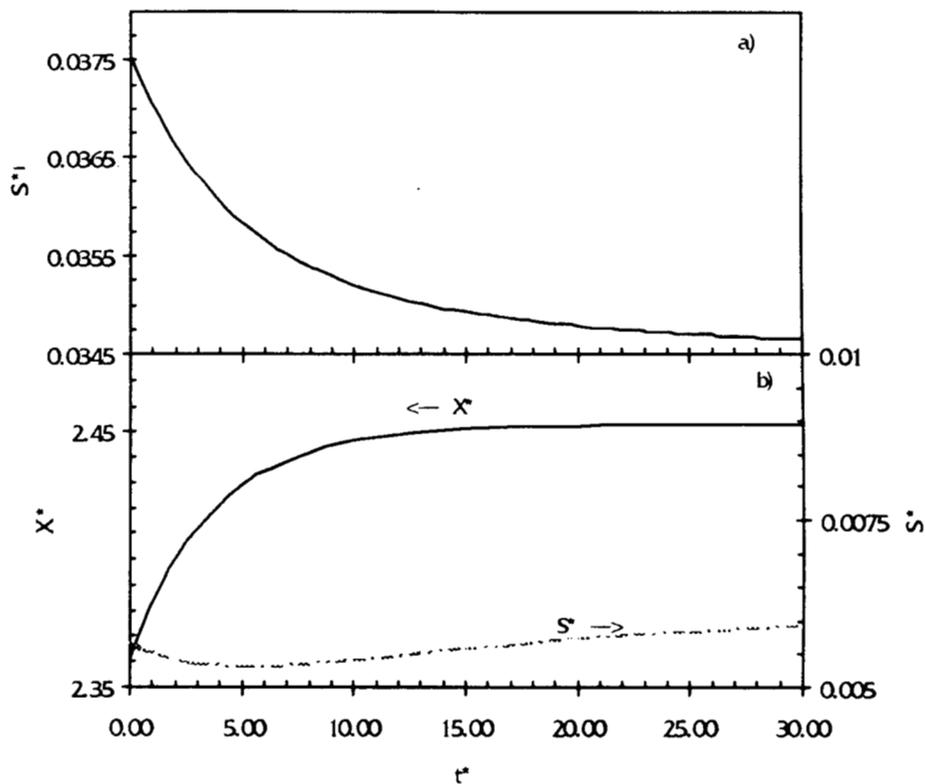
Para validar el modelo matemático ante perturbaciones tipo escalón en el flujo de alimentación se realizó el siguiente escalón:

- $F_I = 4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ a $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$

Los resultados se muestran en las Figuras 4.12a y b, la disminución del tiempo de residencia no afecta notablemente el comportamiento dinámico del reactor.

Las concentraciones de sustrato, oxígeno, y biomasa no cambian aun reduciendo el tiempo de residencia de 5 a 2 horas y teniendo una concentración mayor de alimentación de sustrato. Es decir, no existen cambios en el estado estacionario que se tenía inicialmente para el sustrato en el líquido y la biomasa en la película. Por otra parte, el sustrato en la película tiene cambios mínimos en su concentración pero éstos no afectan fuertemente el comportamiento dinámico del reactor, el cual mantiene aproximadamente el estado estacionario que tenía antes del escalón.

$$F_1 = 4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1} \text{ A } 1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$$



Figuras 4.12 a) Concentración del sustrato en la fase líquida,
 b) concentración promedio del sustrato y biomasa en la película.

Los resultados ante un cambio en el flujo de alimentación son representativos para efecto de estudio, aunque éstos no coinciden cualitativamente con los de Chávez-

Rivera (1994). Los resultados experimentales muestran que el comportamiento dinámico del reactor es dependiente de los cambios en el tiempo de residencia, reducir el tiempo de residencia implica que los microorganismos tarden más en adaptarse a los cambios realizados (Figura 4.13).

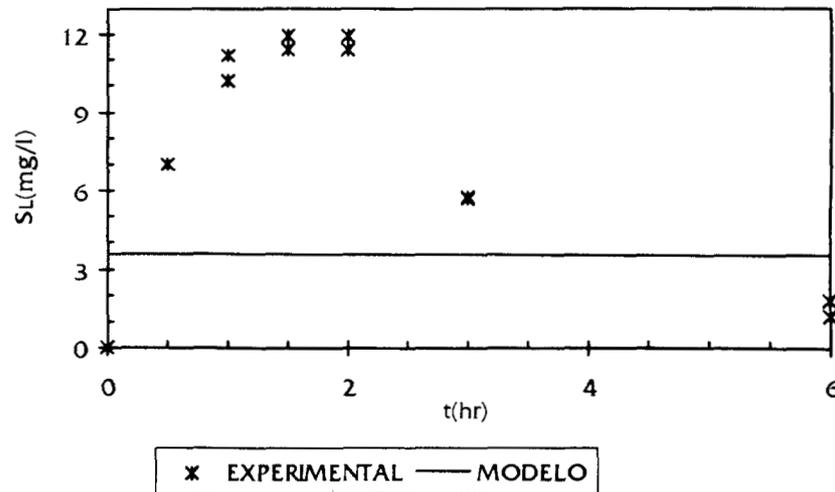


Figura 4.13 Validación del modelo matemático

El comportamiento dinámico del sistema no es afectado ante un cambio en el flujo de alimentación, la degradación del sustrato y la tasa de crecimiento de los microorganismos son constantes. Esta respuesta se obtiene para el conjunto de parámetros que se alimentó al modelo matemático para este caso en especial. El mecanismo dominante para la cinética usada que describe a esta cierta clase de microorganismos, es el crecimiento, por lo que la resistencia a la transferencia de masa es despreciable no afectando al proceso.

4.6 Efecto de la los Parámetros de Transferencia de Masa Internos (D_{ef}/λ)

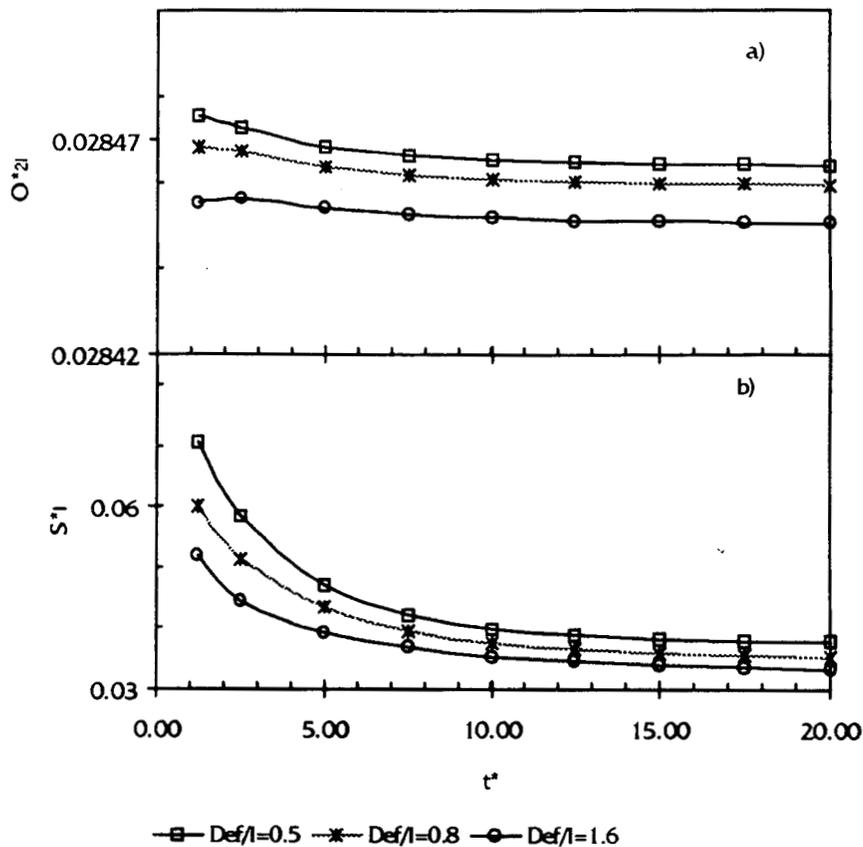
Con la finalidad de estudiar el efecto de los parámetros de transporte internos en el proceso de degradación del afluente, se realizaron tres simulaciones con diferentes valores para la relación difusividad-grosor de la película con el fin de analizar la importancia de los fenómenos de transporte en la película

- $0.5D_{ef}/\lambda$
- $0.8D_{ef}/\lambda$

- $0.8D_{ef}/0.5\lambda$

Los datos de estas simulaciones se presentan en las Tablas B.2 y B.3 del apéndice B. En las Figuras 4.14a, b, c, y d, se muestra el comportamiento dinámico que describe el modelo propuesto con las siguientes condiciones de alimentación: flujo del afluente fijo de $1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ y concentración de sustrato de $S_{LE}^* = 1.00$.

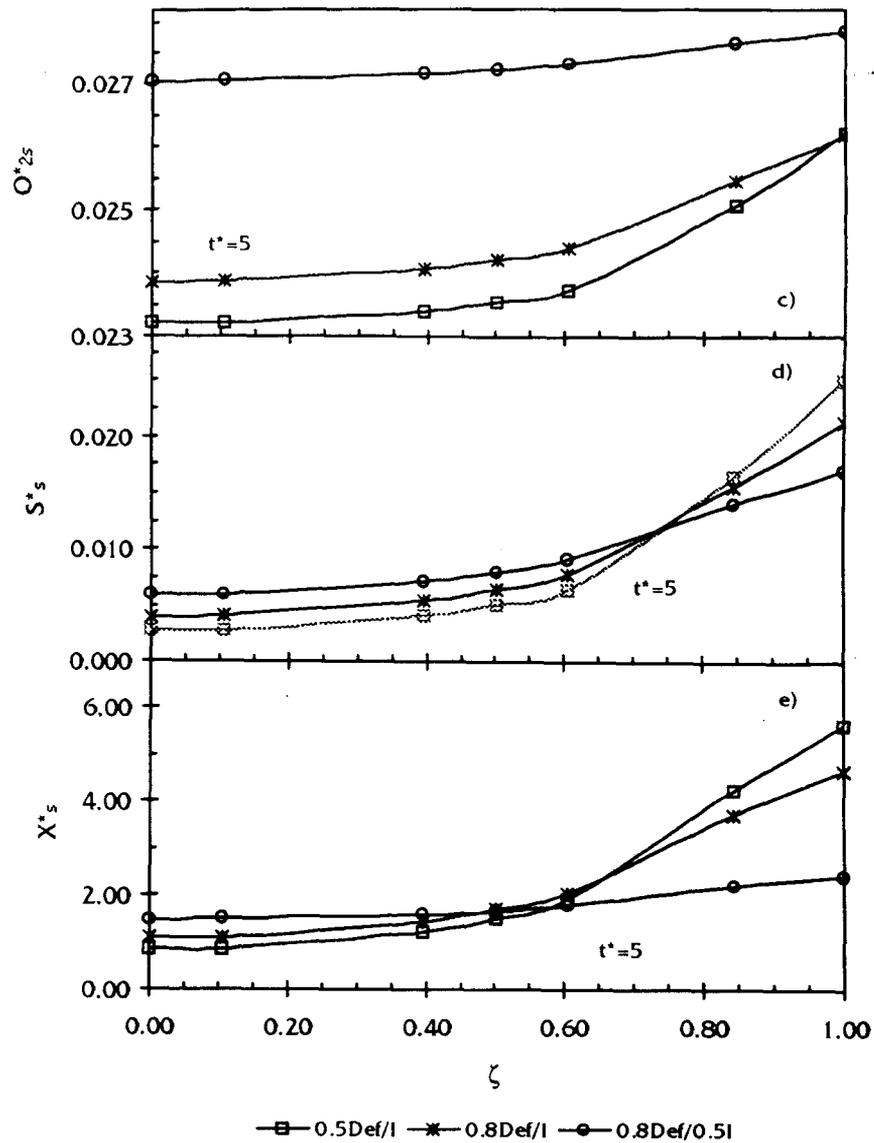
- $0.5D_{ef}/\lambda$
- $0.8D_{ef}/\lambda$
- $0.8D_{ef}/0.5\lambda$



Figuras 4.14 Concentración en el líquido a) oxígeno, b) sustrato.

En las Figuras 4.14a y b se observa que el efecto de la relación entre la difusividad y el grosor de la película no es un proceso relativamente importante en la dinámica de la fase líquida que representa este modelo. La resistencia de transferencia de masa del sustrato y oxígeno de la fase líquida a la sólida no se ve notablemente afectada, pues los perfiles son similares para las relaciones que van de 0.5 a 1.60.

$0.5D_{ef}/\lambda$
 $0.8D_{ef}/\lambda$
 $0.8D_{ef}/0.5\lambda$



Figuras 4.14 Perfiles de concentración en la película c) oxígeno, d) sustrato, e) microorganismos.

Al disminuir la relación difusividad-espesor de la película, el sustrato se acumula más en la interfase líquido-sólido, como consecuencia de la dificultad del sustrato a difundirse al interior de la película microbiana. De tal forma que la concentración de microorganismos de la capa 7 se incrementa al existir más sustrato en la interfase.

En las Figuras 4.14c, d y e se muestran los perfiles para el oxígeno, el sustrato y los microorganismos en el espesor de la película para un tiempo adimensional $t^*=5$, en las cuales se puede observar que para una relación difusividad-espesor de menor magnitud ($0.5D_{ef}/\lambda$), el sustrato no se difunde con tanta facilidad por la película, acumulándose en la interfase líquido-sólido, implicando que los perfiles de sustrato y de biomasa en el interior de la película sean menores que para los dos casos que se presentan. En los puntos interiores de la película, los microorganismos crecen menos ya que el sustrato no es suficiente para que completen sus funciones metabólicas. Sin embargo, en la interfase sólido-líquido al acumularse más sustrato, el crecimiento de los microorganismos aumenta.

El número de Biot indica cuando la resistencia interna de transporte de masa se hace más importante que la externa. Un número de Biot mayor ($0.5D_{ef}/\lambda$, $Bi_S= 4.41$, $Bi_{O_2}= 5.69$) significa que la resistencia a la transferencia de masa por difusión aumenta, provocando que el sustrato (nutriente más importante para el crecimiento de la biomasa) se difunda con menor facilidad, lo que implica que la capa externa de microorganismos tenga un crecimiento menos limitado. Un número de Biot menor ($0.8D_{ef}/0.5\lambda$, $Bi_S= 1.37$, $Bi_{O_2}= 1.77$) significa que no existan problemas tan notables en la difusión del sustrato al interior de la película por lo que no hay un aumento notable en la concentración de microorganismos que se encuentran en la interfase líquido-sólido. Los perfiles en los puntos interiores de la película para el sustrato, oxígeno, y biomasa son planos.

Una película de mayor espesor ($0.5D_{ef}/\lambda$) limita la transferencia de masa por difusión, tal que el fenómeno que sucede más rápido en el proceso es la transferencia desde el líquido hasta la película, permitiendo que el sustrato y el oxígeno se transporten más rápido de lo que se difunden al interior de la película microbiana.

Sin embargo para una relación ($0.8D_{ef}/0.5\lambda$), la mayor parte de la película está activa, dado que en los puntos internos aun existe aumento en la concentración de los microorganismos, esto es una consecuencia de la disminución notable de los problemas de difusión del sustrato y del oxígeno a los puntos interiores de la película, tal como lo

indican los números de Biot y de Damköhler, lo que implica que la transferencia de masa por difusión se facilite.

Nuevamente, es interesante señalar que el modelo predice que sólo un espesor de la película está activo, en tanto que los microorganismos de los puntos internos de la película se encuentran realizando metabolismo endógeno sólo para su mantenimiento. El modelo predice que sólo un 40% de la película está activa, es decir, el grosor varía de 40 a 60 μm .

4.7 Efecto del Coeficiente de Transferencia de Masa Global del Líquido

Para estudiar el efecto del coeficiente de transferencia de masa de la fase líquida en el proceso de la degradación del afluente se realizaron tres simulaciones variando el coeficiente de transferencia en la fase líquida ($K_L=0.00062\text{ms}^{-1}$).

- $K_{L1} = 1.2K_L$
- $K_{L2} = K_L$
- $K_{L3} = 0.80K_L$

El coeficiente 2 ($K_{L2}=K_L$) utilizado en el caso 1 se usará como base para comparar entre las simulaciones. Todas las simulaciones que se muestran se realizaron para el mismo flujo ($1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$) y concentración de sustrato alimentado ($S_{LE}^* = 1.00$).

El coeficiente de transferencia entre el gas y el líquido es función de la velocidad del gas, si la velocidad del gas aumenta provocará que exista una mayor transferencia de oxígeno de la fase gaseosa a la líquida. Un coeficiente global de transferencia del líquido de mayor magnitud favorece la transferencia del oxígeno desde el gas hacia el líquido, tal como lo muestran los perfiles de la Figura 4.15a. Existen diferencias entre los perfiles para un coeficiente $K_{L1} = 1.2K_L$ y para uno de $K_{L3} = 0.80K_L$, de tal forma que para K_{L1} existe una mayor transferencia del oxígeno al líquido como lo muestra la Figura 4.15b la concentración de oxígeno en el líquido para ese coeficiente es mayor que para K_{L3} en que la transferencia de masa es menor.

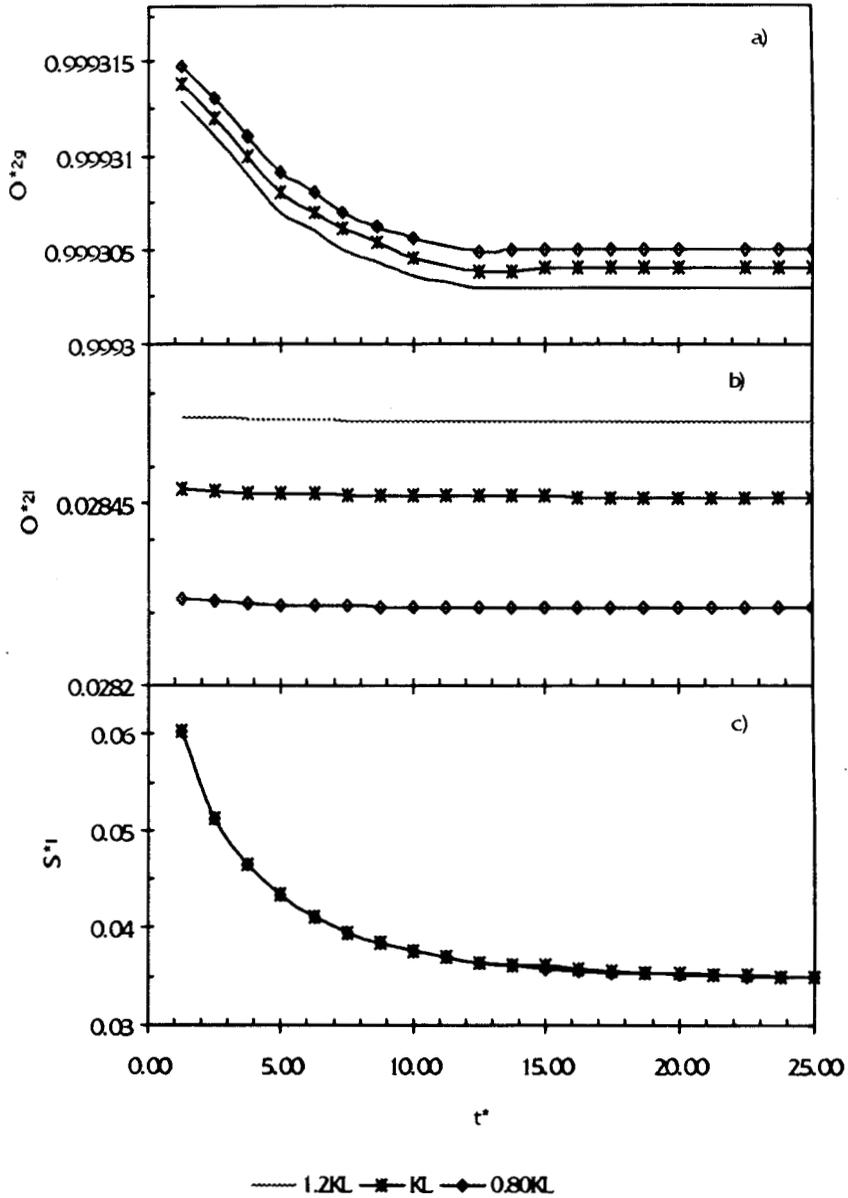
Es importante señalar que el coeficiente de transferencia global en la fase líquida sólo afecta directamente la transferencia del oxígeno de la fase gas a la líquida. Esto se

ve claramente en la concentración del sustrato que no cambia su comportamiento dinámico, ya que no está relacionado con este coeficiente (Figura 4.15c).

$$K_{L1} = 1.2K_L$$

$$K_{L2} = K_L$$

$$K_{L3} = 0.80K_L$$



Figuras 4.15 Concentración a) oxígeno en la fase gas, b) oxígeno en el líquido, c) sustrato en el líquido.

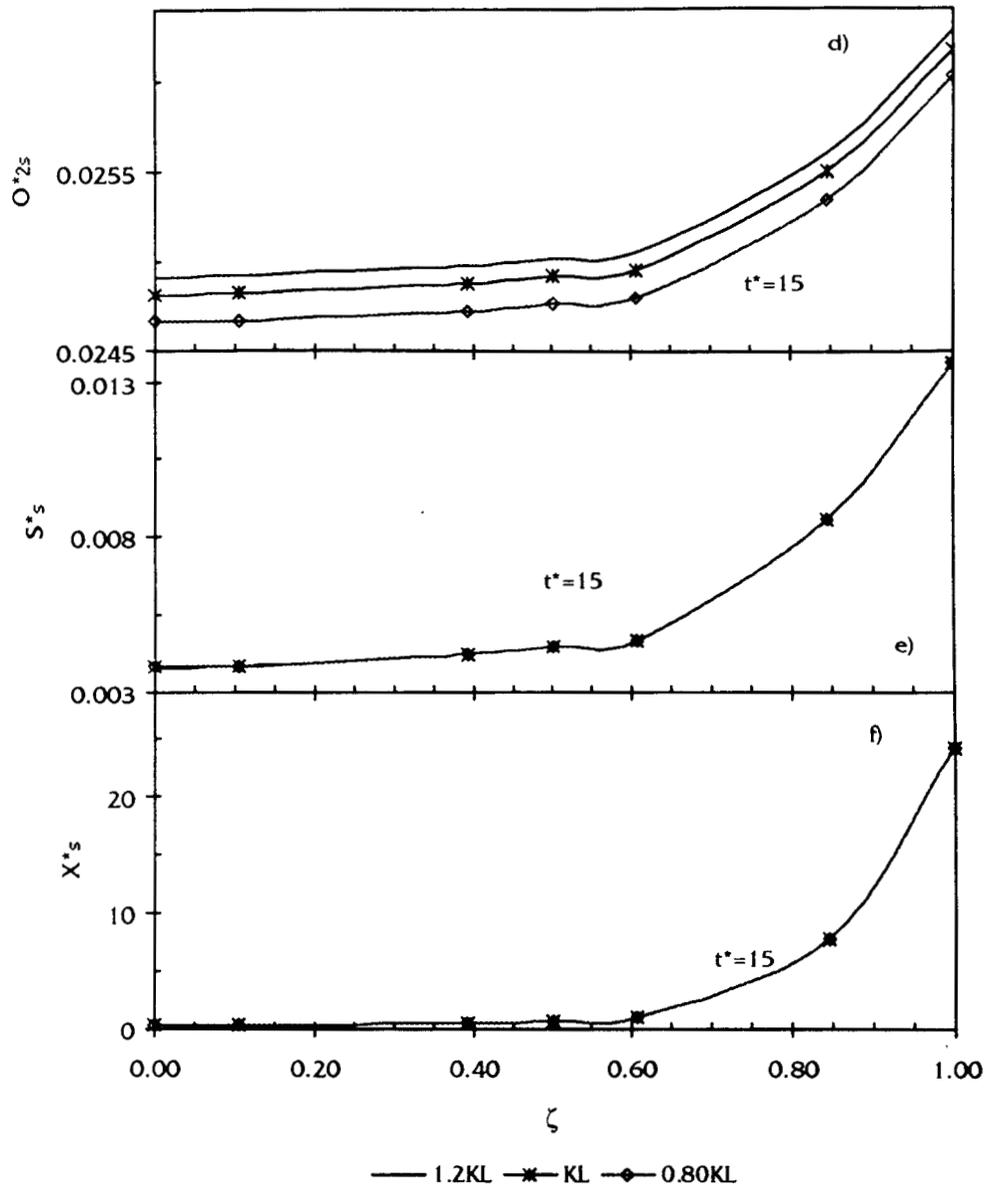
Los perfiles en la película (Figuras 4.15d, e, y f), para un tiempo $t^* = 15$ muestran que existe únicamente acumulación de oxígeno en la película cuando se utiliza un

coeficiente de transferencia mayor. La acumulación de oxígeno en la película no afecta el consumo de sustrato y de oxígeno por parte de los microorganismos que tampoco cambian sus funciones metabólicas.

$$K_{L1} = 1.2K_L$$

$$K_{L2} = K_L$$

$$K_{L3} = 0.80K_L$$



Figuras 4.15 Concentración en la película d) oxígeno, e) sustrato, f) microorganismos.

El coeficiente de transferencia global al afectar únicamente al oxígeno, no tiene influencia en las funciones metabólicas de los microorganismos que consumen la misma cantidad de sustrato y oxígeno para su crecimiento y la degradación del afluente orgánico. El mecanismo dominante para el conjunto de parámetros que se alimentó al modelo matemático es el crecimiento de los microorganismos.

4.8 Efecto del Coeficiente de Transferencia de Masa Líquido-Sólido

Para estudiar el efecto del coeficiente de transferencia de masa de la fase líquida a la sólida en el proceso de la degradación del afluente se realizaron tres simulaciones con diferentes valores para el coeficiente de transferencia local líquido-sólido ($k_{ls}=4 \times 10^{-5} \text{ms}^{-1}$).

- $k_{ls1} = 1.1k_{ls}$
- $k_{ls2} = k_{ls}$
- $k_{ls3} = 0.80k_{ls}$

El coeficiente 2 ($k_{ls2} = k_{ls}$) utilizado en el caso 1 se usó como base para comparar entre las simulaciones. Todas las simulaciones que se muestran se realizaron para el mismo flujo ($1.036 \times 10^{-7} \text{m}^3 \text{s}^{-1}$) y concentración de sustrato alimentado ($S_{LE}^* = 1.00$).

El aumento en el coeficiente de transferencia local líquido-sólido implica que el sustrato y el oxígeno se transfieran con mayor facilidad a la película (Figuras 4.16a y 4.16b). La resistencia externa de transporte de masa disminuye al aumentar el coeficiente local, pero como se puede observar en la Figura 4.16c, d y e el consumo de oxígeno y de sustrato es el mismo.

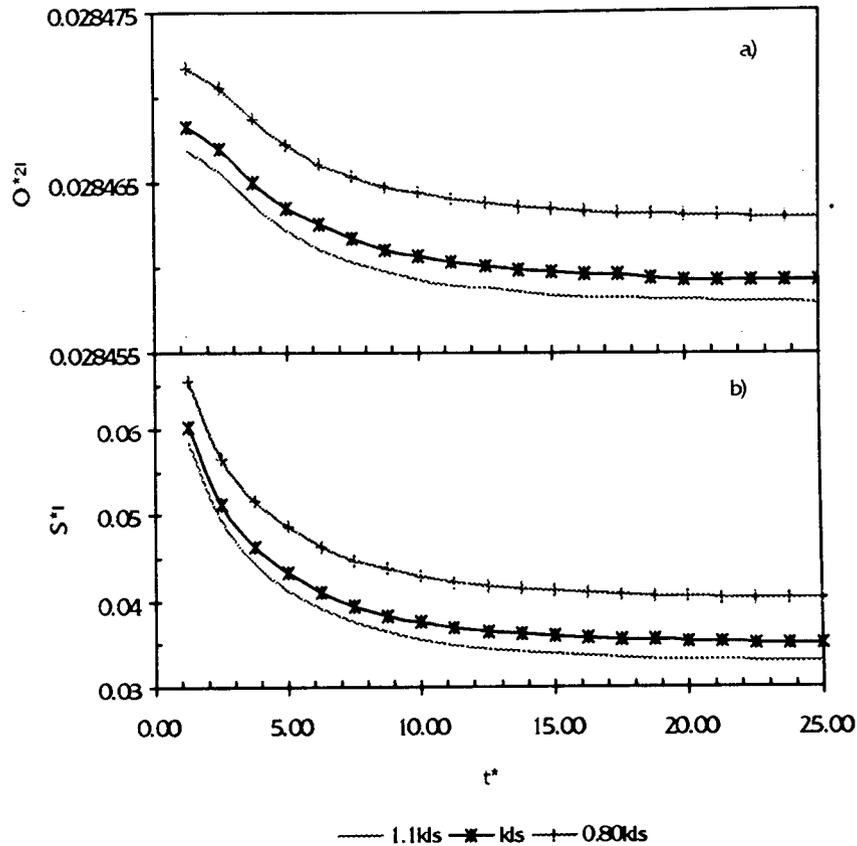
Los perfiles para los coeficiente k_{ls1} y k_{ls3} en cuanto al consumo de sustrato y al crecimiento de microorganismos es el mismo. El oxígeno en la película únicamente se acumula, pero no por esto los microorganismos cambian su tasa de consumo de sustrato; es decir, no existe un cambio notable en el proceso de degradación del afluente; se logra el mismo consumo de sustrato y de oxígeno lo que implica que el crecimiento de microorganismos sea similar.

De las simulaciones realizadas se observa que aun cuando el coeficiente local líquido-sólido disminuya en una diferencia de 30%, no se existe cambio alguno en el consumo de sustrato y aumento en la concentración de biomasa. Esta es una consecuencia de que el fenómeno de transferencia externa de masa no domina el proceso, sino la cinética de crecimiento de los microorganismos.

$$k_{ls1} = 1.1k_{ls}$$

$$k_{ls2} = k_{ls}$$

$$k_{ls3} = 0.80k_{ls}$$



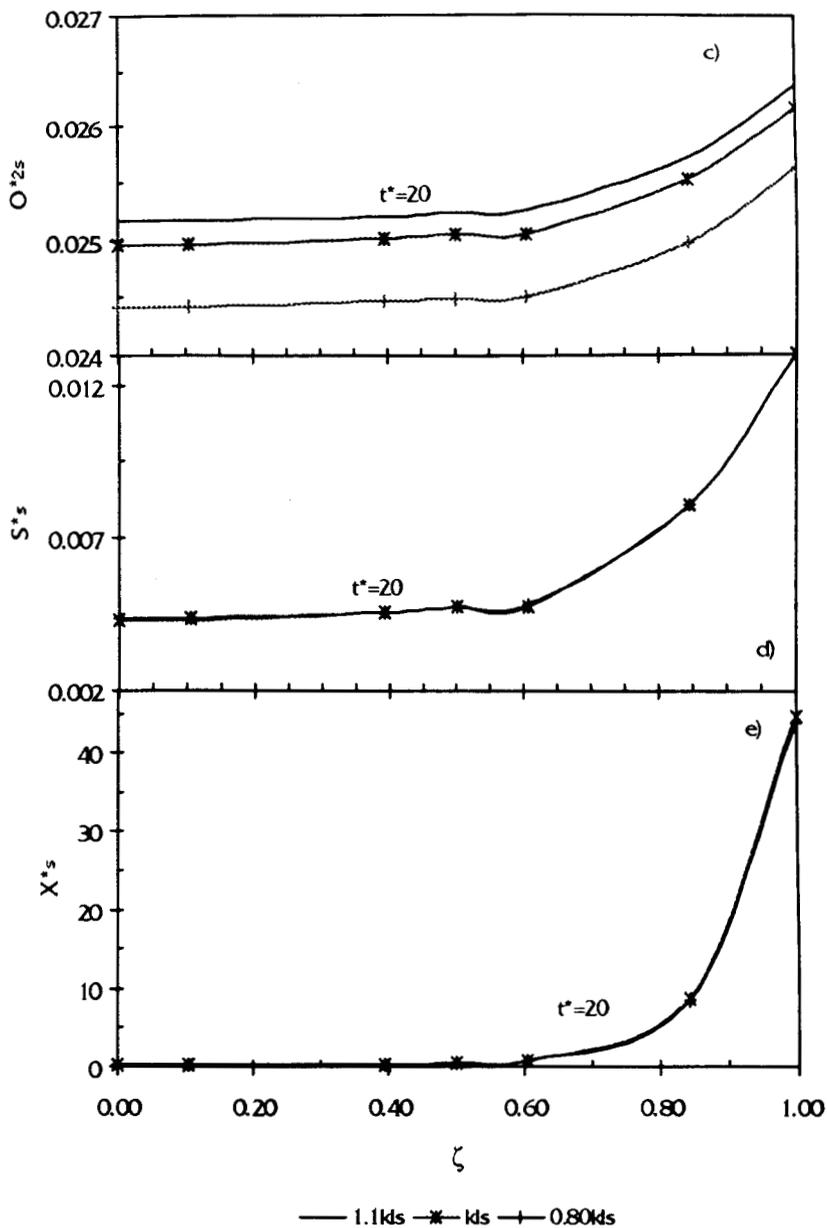
Figuras 4.16 Concentración en el líquido a) oxígeno, b) sustrato.

El hecho de que el comportamiento dinámico de los microorganismos sea el mismo para las simulaciones presentadas se debe a que el nutriente más importante en el metabolismo es el sustrato orgánico. El proceso limitante para el sustrato es la difusión al interior de la película, no importando el coeficiente de transferencia líquido-sólido dentro de los rangos presentados, por lo que los perfiles de sustrato en la película son los mismos.

$$k_{1s1} = 1.1k_{1s}$$

$$k_{1s2} = k_{1s}$$

$$k_{1s3} = 0.80k_{1s}$$



Figuras 4.16 Concentración en la película c) oxígeno, d) sustrato, e) microorganismos.

4.9 Conclusiones

A partir de los estados estacionarios que se encontraron para los dos flujos del efluente líquido se aplicaron perturbaciones en la concentración del sustrato y en su flujo de

alimentación. Por medio de las simulaciones se alcanzaron diferentes estado estacionarios dependiendo del tipo y magnitud del escalón alimentado.

El modelo matemático predice dos estados estacionarios importantes, en el primero el sistema es capaz de asimilar el escalón en la concentración del sustrato alimentado. En la película, el sustrato alcanza en todos los casos el mismo valor del estado estacionario inicial. Para la biomasa, el valor del nuevo estado estacionario es más alto, esto es una consecuencia de la remoción de materia orgánica que realizan los microorganismos, la máxima remoción de sustrato realizada por una población dada de microorganismos ocurre cuando se alcanza su máximo crecimiento. De tal forma que existe un crecimiento de biomasa a expensas de una concentración de sustrato orgánico mayor en la alimentación.

En el segundo estado estacionario, el cual sucede cuando el sustrato alcanza una concentración máxima que los microorganismos ya no pueden tolerar, el sistema microbiano se inhibe totalmente y ya no es capaz de asimilar el escalón alimentado. La consecuencia de que los microorganismos se encuentren inhibidos por el sustrato, es que el reactor parecería no tener catalizador biológico, lo que implica que la concentración de sustrato y oxígeno alimentados sea igual a la entrada que a la salida, sin que exista ninguna reacción bioquímica en el reactor.

La diferencia esencial entre los dos flujos de alimentación es que para un flujo de alimentación menor el tiempo de asimilación ante una perturbación es menor, es decir, el tiempo de residencia del líquido es mayor y el sistema tiene más tiempo para adaptarse a los cambios, aun para concentraciones de sustrato elevadas.

En general, el modelo describe la existencia de una película de microorganismos constante, y activa, que es la que permite la degradación del sustrato orgánico. Esta capa de microorganismos está representada cualitativamente por la capa 6 de biomasa, aunque cuantitativamente no lo sea. Si el grosor de la película disminuye, la concentración de microorganismos aumenta para lograr que la degradación del sustrato sea la misma, bajo las mismas condiciones de operación del reactor.

Los cambios en el flujo de alimentación no afectan notablemente la dinámica del reactor, ni aun reduciendo el tiempo de residencia de 4 a 2 horas, el reactor reacciona adecuadamente, sin cambios en su comportamiento. Es decir, el mecanismo por transferencia de masa no es dominante.

De los parámetros importantes que se analizaron, la relación difusividad-espesor de la película no afecta fuertemente el comportamiento dinámico de la fase líquida del reactor. La disminución en esta relación provoca que el transporte de sustrato y de oxígeno por difusión en el interior de la película sea más lento, lo que implica que al acumularse sustrato en la interfase líquido-sólido se obtenga una concentración de microorganismos mayor que para una difusividad de magnitud mayor.

En cuanto al aumento en la relación difusividad-grosor de la película, el transporte por difusión aumenta, facilitando que el sustrato y el oxígeno se difundan hacia el interior de la película, de tal forma que la película al tener sustrato en los puntos interiores se mantiene activa al consumir el sustrato existente en esos puntos.

La variación en los coeficientes de transporte global en el líquido y el local líquido-sólido no afectan el comportamiento dinámico del reactor. Para todos los casos estudiados se logra la misma degradación del sustrato con el mismo consumo de oxígeno, aumentando la concentración de la biomasa en forma similar.

Se concluye que el modelo matemático ante cambios bruscos en la concentración de alimentación del sustrato representa adecuadamente los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994) cualitativamente.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

En este capítulo se presentan las conclusiones en general del modelo planteado, de los resultados de las simulaciones y de su validación con los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994).

El modelo matemático propuesto genera estados estacionarios cuantitativamente diferentes para los dos flujos de alimentación de referencia, pero con el mismo comportamiento dinámico en las tres fases del reactor.

Los diversos cambios abruptos en la concentración del sustrato orgánico se realizaron para probar la capacidad del modelo al describir la operación del reactor biológico ante tales situaciones. Dados los cambios realizados, el modelo matemático encuentra dos estados estacionarios. Para el primero, el modelo reproduce una degradación del sustrato del 99% permitiendo la operación continua del reactor. Para estos escalones de concentración de sustrato moderados, el modelo reproduce adecuadamente los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994), sin embargo, el modelo genera un estado estacionario diferente (de valor más alto) al experimental; tal diferencia se debe a que los microorganismos experimentan un cambio a la tolerancia de concentraciones altas de sustrato, cambiando así sus parámetros cinéticos (bioquímicos), pero el modelo matemático no considera esto.

El segundo estado estacionario que predice el modelo matemático es el que se genera para escalones de mayor magnitud. En este caso el sistema no asimila los cambios realizados debido a que la concentración de sustrato que se alcanza es tal que inhibe el crecimiento y metabolismo de los microorganismos. El modelo propuesto

reproduce cualitativamente los datos experimentales de Chávez-Rivera (1994), aunque la concentración a la cual se predice la inhibición de la biomasa es menor que la experimental.

El modelo reproduce el hecho de que si el reactor opera a flujos de alimentación bajos y se aumenta gradualmente la concentración de alimentación del sustrato, el reactor puede ser capaz de tales cambios, sin tener que llegar a tener inhibida a la biomasa. Esto es consecuencia del aumento de la actividad y capacidad de la película ya sea por el aumento de su concentración o de su capacidad enzimática.

El modelo supone un espesor de película fijo, lo cual es una limitación, sin embargo, permite conocer el comportamiento dinámico en la concentración de los microorganismos, de oxígeno, y de sustrato, en cada capa que conforma a la película. El modelo predice que sólo un espesor de la película está activo, mientras que los puntos internos de la película se encuentran realizando metabolismo endógeno sólo para su mantenimiento, los puntos externos siguen degradando al sustrato y aumentando su concentración. El modelo predice que sólo el 40% de la película está activa, lo que implica que el grosor activo para los casos presentados varía de 40 a 60µm, lo cual está de acuerdo con los valores reportados en la literatura (50 a 100µm).

Como el modelo no considera el crecimiento en el espesor de la película, en la interfase líquido-sólido, la biomasa (punto 7) aumenta su concentración "infinitamente" y en un momento dado dificultaría el conocimiento "real" de su concentración. Ante esta limitación del modelo, el crecimiento en el espesor de la película está representado por el aumento en la concentración de microorganismos en la capa 7, este aumento en la concentración se debe a que este punto no tiene un volumen real, y solo está representado como un punto en la superficie externa.

En cuanto a los escalones en la disminución abrupta del flujo de alimentación (menor tiempo de residencia), estos no producen efectos importantes en la operación del reactor. La concentración del sustrato en la película es la única variable que tiene cambios, pero poco significativos. Por lo tanto, el mecanismo que domina el proceso es

la cinética de crecimiento de los microorganismos para el conjunto de parámetros que describe a este sistema en particular.

Los problemas por resistencia debidos a la difusión del sustrato y del oxígeno disminuyen cuando se tiene una constante de difusividad mayor y un grosor de película menor; el efecto más notable es que para ambos casos la película aumenta su concentración en la interfase líquido-sólido como consecuencia de la acumulación de sustrato en ese punto.

El aumentar o disminuir los coeficientes de transporte global en el líquido y el local líquido-sólido no tiene un efecto importante en el comportamiento de la película, porque el modelo reproduce la misma degradación del sustrato obteniéndose el mismo aumento en la concentración de los microorganismos en la película. El mecanismo que domina al proceso de degradación del sustrato para la cinética presentada en este trabajo y que describe a una cierta clase de microorganismos es el crecimiento. Sin embargo, no es así para todos los casos que existen para degradación de afluentes, ya que puede ser que la resistencia a la transferencia externa de masa y la difusión limiten el crecimiento de los microorganismos.

Para que el modelo pudiera aproximarse más a la realidad del proceso, sería ideal la contabilización del espesor de la película a la vez que se describe el comportamiento dinámico del sustrato, oxígeno y biomasa en las diferentes capas que forman la película.

Por último, sería interesante escalar el reactor biológico por medio del modelo matemático, por lo regular el escalamiento de procesos biológicos es complicado porque las resistencias al transporte de masa existentes aumentan su magnitud complicando la operación del reactor.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Andrews, G. (1988). "Effectiveness Factor for Bioparticles with Monod Kinetics". *The Chemical Engineer Journal* **37**: B31-B37.

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

Burden, R. L., y Faires, J. D. Análisis Numérico. Gpo. Editorial Iberoamérica. México, 1985.

Characklis, W. G. Process Analysis in Microbial Systems in Mathematical Models in Microbiology. London, 1983.

Chávez-Rivera, R. A. A Biofilm Reactor for Degradation of Chlorinated Hydrocarbons. Ph.D. Dissertation, Department of Chemical Engineering, University of Cambridge, U. K., 1994.

de Beer, D. y Stoodley, P. (1995). "Relation Between the Structure of an Aerobic Biofilm and Transport Phenomena". International Conference Workshop on Biofilm Structure, Growth & Dynamics, Noordwijkerhout, The Netherlands.

Engasser, J. M. (1988). "Bioreactor Engineering: The Design and Optimization of Reactors with Living Cells". *Chemical Engineering Science*. **43**(8):1739-1748.

Fan, L. S., Leyva-Ramos, R., Wisecarver, K. D., y Zehner, B. J. (1990). "Diffusion of Phenol Through a Biofilm Grown on Activated Particles in a Draft-Tube Three Phase Fluidized-Bed Bioreactor". *Biotechnology and Bioengineering*. **35**:279.

Finlayson, B. A. Non linear Analysis in Chemical Engineering. McGraw-Hill Inc. U.S.A., 1980.

- Freitas dos Santos, L. M., y Livingston, A. (1995), "Membrane-Attached Biofilms for VOC Wastewater Treatment I: Novel in Situ Biofilm Thickness Measurement Technique". *Biotechnology and Bioengineering* **47**: 82-89.
- Freitas dos Santos, L. M., y Livingston, A. (1995), "Membrane-Attached Biofilms for VOC Wastewater Treatment II: Effect of Biofilm Thickness on Performance". *Biotechnology and Bioengineering* **47**: 90-95.
- Froment, G. F., y Bischoff, K.B. *Chemical Reactor Analysis and Design*. 2a. ed., John Wiley & Sons, Inc. U.S.A., 1990.
- Lapidus, L. *Digital Computation for Chemical Engineers*. McGraw-Hill Inc. U.S.A., 1962.
- Levenspiel, O. *The Chemical Reactor Omnibook*. OSU Book Stores, Inc. U.S.A., 1993.
- Livingston, A., y Chase, H. A. (1989). "Modeling Phenol Degradation in a Fluidized-Bed Bioreactor". *AIChE Journal* **35**: 1980-1992.
- Livingston, A. (1991). "Biodegradation of 3-4 Dichloroaniline in a Fluidized Bed Bioreactor and a Steady-State Biofilm Kinetic Model". *Biotechnology and Bioengineering* **38**: 260-272.
- Moo-Young, M. y Blanch, H. W. (1981). "Design of Biochemical Reactors Mass Transfer Criteria for Simple and Complex Systems". *Advanced in Biochemical Engineering* **19**: 2-65.
- Moo-Young, M., y Kargi, F. "The Principles of Biotechnology: Engineering Considerations" en *Comprehensive Biotechnology, The principles, Applications and Regulations of Biotechnology in Industry, Agriculture and Medicine*. Editor Moo-Young, M. Vol. 2 Pergamon Press Ltd. 5a. ed. Great Britain, 1985.
- Perry, R. H. y Chilton, C. H. Eds., *Chemical Engineers' Handbook*, 5a. ed., McGraw-Hill, New York, 1973.
- Quintero, R. R. *Ingeniería Bioquímica*. 1a. ed., Alhambra Mexicana. México, 1993.
- Sáez, P. E. y Rittmann, B. E. (1988). "Improved Pseudoanalytical Solution for Steady-State Biofilm Kinetics". *Biotechnology and Bioengineering*. **32**: 379-385.

Shah, Y.T., Kelkar, B.G., Godbole, S.P., Deckwer, W.D. (1982). "Design Parameters Estimations for Bubble Column Reactors". *AIChE Journal* **28**: 353-379.

Skowlund, C.T. y Kirmse, D. W. (1989). "Simplified Models for Packed-Bed Biofilm Reactors". *Biotechnology and Bioengineering* **35**(5): 164-172.

Skowlund, C.T. (1990). "Effect of Biofilm Growth on Steady-State Biofilm Models". *Biotechnology and Bioengineering* **35**:502-510.

Sokól, W. (1988). "Dynamics of Continuous Stirred-Tank Biochemical Reactor Utilizing Inhibitory Substrate". *Biotechnology and Bioengineering* **31**: 198-202.

Viessman, W. Jr. y Hammer, M. J. *Water Supply and Pollution Control*. 5a. ed., Harper Collins College Publishers. U.S.A., 1993.

Villadsen, J., Michelsen, M. L. *Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation*. Prentice-Hall, Inc., U.S.A., 1978.

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

Wanner, O. y Gujer, W. (1986). "A Multispecies Biofilm Model". *Biotechnology and Bioengineering* **28**: 314-328.

Wanner, O. (1995). "New Experimental Findings and Biofilm Modelling Concepts". International Conference Workshop on Biofilm Structure, Growth & Dynamics, Noordwijkerhout, The Netherlands.

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

APÉNDICE A

MÉTODOS NUMÉRICOS

El modelo propuesto consta de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias resultantes de los balances de masa para el oxígeno en fase gas y fase líquida, para la biomasa en la fase sólida y para el sustrato en la fase líquida; y de dos ecuaciones diferenciales parciales parabólicas no-lineales que describen el comportamiento del oxígeno y el sustrato en la película.

Las ecuaciones parciales se discretizaron por colocación ortogonal en elemento finito (Finlayson, 1980). El método numérico permite que las ecuaciones parciales sean aproximadas a ecuaciones ordinarias de tal forma que sólo sean función del tiempo. Las ecuaciones resultantes se integraron por medio de un método implícito.

A continuación se explican los métodos utilizados y la forma de cálculo de las concentraciones promedio del sustrato, oxígeno y microorganismos en la película por medio de funciones de peso.

A1. COLOCACIÓN ORTOGONAL EN ELEMENTO FINITO

En este método numérico (Finlayson, 1980) se combinan las ventajas de dos métodos, de colocación ortogonal el pequeño error que se genera en la solución, y de diferencias finitas la localización de puntos donde es necesario conocer la solución.

Cuando la solución tiene considerables gradientes, es más ventajoso usar funciones de prueba (series de polinomios ortogonales) que están definidas sólo sobre una parte de la región y al unir todas las funciones se puede obtener una aproximación sobre todo el dominio. Las pequeñas regiones pueden ser utilizadas cerca de los gradientes considerables y la solución aproximada es mejorada.

En colocación ortogonal en elementos finitos se divide el dominio en pequeños subdominios, los cuales son llamados elementos finitos. Se requiere que la función y su primera derivada sean continuas en las fronteras entre los elementos, cuando se usan polinomios de tipo de Legendre.

Los residuos son usados para poder elegir dónde localizar los elementos, los cuales pueden estar aglomerados en las regiones donde la solución tiene grandes gradientes.

Dentro de cada elemento se define una nueva variable:

$$u' = \frac{(x - x_1)}{\Delta x_1} \quad \text{A.1}$$

$$\Delta x_1 = x_{i+1} - x_i \quad \text{A.2}$$

de tal forma que en los puntos de colocación interiores, se tiene $P_n(u) = 0.0$, donde P_n es un polinomio de Legendre definido en $0 \leq u \leq 1$.

Dentro de cada elemento se aplican los procedimientos usuales de colocación ortogonal, se escriben las ecuaciones diferenciales en los puntos de colocación; el residual es evaluado en los puntos interiores de colocación. Si se tiene NE elementos y NCOL puntos interiores de colocación entonces NExNCOL es el numero total de condiciones residuales.

En la división entre los elementos se requiere una función de continuidad y la primera derivada, esto se tendrá NE-1 condiciones en las fronteras de los elementos:

$$c_{N_i+2}^i = c_1^{i+1} \quad \text{A.3}$$

$$l = 1 \rightarrow NE - 1 \quad j = N + 2$$

(Condición de la derivada) A.9

$$S(N + 2, i, l) = \begin{cases} A_{N+2,i} \\ A_{N+2,i} - \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}} \end{cases} \quad i = N + 2$$

$$l = 2 \rightarrow NE \quad j = 1$$

$$S(1, i, l) = \begin{cases} S(N + 2, N + 2, l - 1) & i = 1 \\ -\frac{\Delta x_{i-1}}{\Delta x_i} A_{1i} & i = 2, \dots, N + 2 \end{cases} \quad \text{(Condición en la derivada) A.10}$$

$$F((N + 1)(l - 1) + 1) = 0.0$$

$$l = NE \quad j = N + 2$$

$$S(N + 2, i, NE) = A_{N+2,i} \quad i = 1, \dots, N + 2 \quad \text{(Condición de frontera) A.11}$$

$$F((N + 1)NE + 1) = F(C)$$

$$l = 1 \rightarrow NE \quad j = 2, \dots, N + 1$$

$$S(j, i, l) = B_{ji} + \Delta_l A_{ji} \quad i = 1, \dots, N + 2 \quad \text{(Residual) A.12}$$

$$F((N + 1)(l - 1) + j) = \Delta_l^2 f(C((N + 1)(l - 1) + j))$$

A.2 MÉTODOS DE CUADRATURA

Si la función está dada explícitamente, los puntos para evaluar la función pueden escogerse de otra manera que nos lleve a una mayor precisión de la aproximación. La cuadratura Gaussiana se preocupa en escoger los puntos de evaluación de una manera optima. Esta presenta un procedimiento para escoger los valores x_1, x_2, \dots, x_n en el intervalo $[a, b]$ y las constantes c_1, c_2, \dots, c_n , que se espera minimicen el error obtenido al realizar la aproximación

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad \text{A.13}$$

para una función arbitraria f . Para medir esta precisión, se supone generalmente que la mejor elección de estos valores será la que maximice el grado de precisión de la fórmula.

Como los valores c_1, c_2, \dots, c_n son arbitrarios y los de x_1, x_2, \dots, x_n están restringidos solo en el sentido de que la función, cuya integral se está aproximando, debe estar definida en estos puntos, hay $2n$ parámetros involucrados, n dados por las constantes c_1, c_2, \dots, c_n y n dados por x_1, x_2, \dots, x_n .

Si los coeficientes de un polinomio se consideran también como parámetros, la clase de polinomios de grado a lo más $(2n-1)$ contiene $2n$ parámetros y es la clase más grande de polinomios para la cual es razonable esperar que la ecuación A.13 sea exacta.

Se dice que el conjunto de funciones $\{f_0, f_1, \dots, f_n\}$ es ortogonal en $[a, b]$ con respecto a la función de peso $w(x) \geq 0$, ($w(x) \neq 0$), siempre y cuando

$$\int_a^b \phi_k(x)\phi_j(x)w(x)dx \quad \text{A.14}$$

es cero cuando $j \neq k$ y positiva cuando $j = k$.

Si $\{f_0, f_1, \dots, f_n\}$ es un conjunto ortogonal de polinomios definidos en $[a, b]$ y f_i es de grado i para cada $i = 0, 1, \dots, n$, entonces para cualquier polinomio Q de grado a lo más n , existen constantes únicas a_0, a_1, \dots, a_n tales que $Q(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i \phi_i(x)$.

Los polinomios de Legendre son ortogonales en $[0, 1]$ con respecto a $w(x) = 1$. No se necesita la representación explícita de los polinomios de Legendre, solo el hecho de que el polinomio P_n , para cada n , tiene n raíces distintas x_1, x_2, \dots, x_n . Considerando la aproximación de una función $[a, b]$ por el polinomio interpolante de Lagrange en x_1, x_2, \dots, x_n :

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} f(x_i) + \frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!} \prod_{i=1}^n (x - x_i) \quad \text{A.15}$$

Como la formula del error involucra a $f^{(n)}$, la regla de cuadratura es:

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) \quad \text{A.16}$$

donde

$$c_i = \int_0^1 \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} dx \quad \text{A.17}$$

A.3 MÉTODO IMPLÍCITO DE INTEGRACIÓN (ADAMS-MOULTON)

Para integrar las ecuaciones resultantes se utilizó un método de integración implícito. Una ecuación diferencial de primer orden más su condición inicial puede escribirse como:

$$\frac{dy}{dt} = y' = f(t, y) \quad t > t_0 \quad \text{A.18}$$

$$y = y_0 \quad \text{en} \quad t = t_0 \quad \text{A.19}$$

Empezando con el valor conocido de y_0 en t_0 , el procedimiento numérico es calcular y_1 en t_1 , y_2 en t_2 , y así sucesivamente hasta cubrir el espacio de t .

Integrando ambos lados de la ecuación:

$$y_n - y_0 = \int_{t_0}^{t_n} f(t, y) dt = \int_{t_0}^{t_n} y' dt \quad \text{A.20}$$

$$y_{n+1} - y_n = \int_t^{t_{n+1}} f(t, y) dt = \int_t^{t_{n+1}} y' dt \quad \text{A.21}$$

El lado izquierdo se puede evaluar si y' o $f(t, y)$ es aproximada por una interpolación polinomial, la integral puede entonces ser explícitamente evaluada, dado

que un polinomio siempre puede ser integrado. La interpolación puede ser escrita en términos de la primera derivada de y , en el lugar de y misma.

En los métodos implícitos se utilizan en más de un punto la información referente a la solución y su derivada, a fin de extrapolar al siguiente punto.

La ecuación de diferencia para encontrar la aproximación t_{i+1} en el punto y_{i+1} puede representarse con la siguiente ecuación, donde m es un entero mayor que 1:

$$w_{i+1} = a_{m-1}w_i + a_{m-2}w_{i-1} + \dots + a_0w_{i+1-m} + h[b_m f(t_{i+1}, w_{i+1}) + b_{m-1}f(t_i, w_i) + \dots + b_0f(t_{i+1-m}, w_{i+1-m})] \quad \text{A.22}$$

para $i=0, 1, \dots, N-1$, donde los valores iniciales $w_0=\alpha$, $w_1=\alpha_1$, ..., $w_{m-1}=\alpha_{m-1}$, están especificados.

Cuando $b_m=0$ el método se denomina método explícito o abierto, cuando $b_m \neq 0$, el método se denomina implícito o cerrado ya que w_{i+1} aparece en ambos lados de la ecuación anterior y esta determinada de forma implícita.

Las ecuaciones

$$w_0=\alpha, w_1=\alpha_1, w_2=\alpha_2, \quad \text{A.23}$$

$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{24} \left[\begin{array}{l} 9f(t_{i+1}, w_{i+1}) + 19f(t_i, w_i) \\ -5f(t_{i-1}, w_{i-1}) + f(t_{i-2}, w_{i-2}) \end{array} \right]$$

para cada $i=2, 3, \dots, N-1$ definen un método implícito de tres pasos conocido como la Técnica de Adams-Moulton de cuarto orden.

Los valores iniciales de las ecuaciones anteriores se deben especificar generalmente suponiendo $w_j=\alpha$, generando los valores que faltan con un método de Runge-Kutta.

Bajo tales condiciones se obtiene un esquema de iteración, donde se estima un valor para y_{n+1} , se sustituye en $f(t_{n+1}, y_{n+1})$ para calcular y mejorar el valor de y_{n+1} .

A.3.1 RUNGE-KUTTA

Las fórmulas llamadas Runge-Kutta pertenecen a los procesos de integración de un sólo paso, es decir, un nuevo punto y_{n+1} puede ser conocido usando la información de un sólo punto y_n . Las fórmulas del Runge-Kutta de cuarto orden son:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= hf(t_n, y_n) \\
 k_2 &= hf(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}) \\
 k_3 &= hf(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}) \\
 k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3) \\
 n &= 0, 1, \dots; O(h^5) \\
 y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
 \end{aligned}
 \tag{A.24}$$

A.4 APLICACIÓN DE LOS MÉTODOS

La forma en que se utilizaron los métodos numéricos es la siguiente:

A partir del balance de masa adimensional para el sustrato en la película:

$$\frac{\partial S_s^*}{\partial t^*} = \frac{1}{\phi_s} \frac{\partial^2 S_s^*}{\partial \zeta^2} - \hat{R}_s \tag{3.21}$$

$$\text{C.I.} \quad @ \quad t^* = 0: S_s^*(0) = S_{s0}^* \tag{3.21a}$$

$$\text{C.F1.} \quad \text{en } \zeta = 0 \quad \forall \quad t^* > 0: \frac{\partial S_s^*}{\partial \zeta} = 0 \tag{3.21b}$$

$$\text{C.F2.} \quad \text{en } \zeta = 1 \quad \forall \quad t^* > 0: \frac{\partial S_s^*}{\partial \zeta} = Bi_s (S_{sb}^* - S_s^*) \tag{3.21c}$$

$$\text{donde} \quad \hat{R}_s = \frac{1}{Y_{x/s}} \left(\frac{O_{2s}^*}{K_{O_2}^* + O_{2s}^*} \right) \left(\frac{S_s^*}{K_s^* + S_s^*} \right) \left(1 - \frac{S_s^*}{S_{máx}^*} \right) X_s^* \tag{3.21d}$$

Se considero que el problema se podía resolver con dos elementos cada uno con dos puntos de colocación interiores, por lo que entonces se obtiene:

NE=2, NCOL=2, N=NE+NCOL=4, por lo que $j=2,3$

Condición de frontera:

$$\frac{1}{\Delta x_1} [A_{11}S_1^1 + A_{12}S_2^1 + A_{13}S_3^1 + A_{14}S_4^1] = 0$$

Residual:

$$\frac{dS_2^1}{dt} = \frac{1}{\phi_s^2} \frac{1}{\Delta x_1^2} [B_{21}S_1^1 + B_{22}S_2^1 + B_{23}S_3^1] - \hat{R}_s(S_2^1, w_2^1, X_2^1)$$

$$\frac{dS_3^1}{dt} = \frac{1}{\phi_s^2} \frac{1}{\Delta x_1^2} [B_{31}S_1^1 + B_{32}S_2^1 + B_{33}S_3^1] - \hat{R}_s(S_3^1, w_3^1, X_3^1)$$

Condición de la derivada y de frontera:

$$\frac{1}{\Delta x_1} [A_{41}S_1^1 + A_{42}S_2^1 + A_{43}S_3^1 + A_{44}S_4^1] = \frac{1}{\Delta x_2} [A_{11}S_1^2 + A_{12}S_2^2 + A_{13}S_3^2 + A_{14}S_4^2]$$

Residual:

$$\frac{dS_2^2}{dt} = \frac{1}{\phi_s^2} \frac{1}{\Delta x_2^2} [B_{21}S_1^2 + B_{22}S_2^2 + B_{23}S_3^2] - \hat{R}_s(S_2^2, w_2^2, X_2^2)$$

$$\frac{dS_3^2}{dt} = \frac{1}{\phi_s^2} \frac{1}{\Delta x_2^2} [B_{31}S_1^2 + B_{32}S_2^2 + B_{33}S_3^2] - \hat{R}_s(S_3^2, w_3^2, X_3^2)$$

Condición de frontera:

$$-\frac{1}{\Delta x_2} [A_{41}S_1^2 + A_{42}S_2^2 + A_{43}S_3^2 + A_{44}S_4^2] = Bi_s(S_4^2 - S_L^2)$$

De igual forma las ecuaciones del oxígeno en la fase sólida se discretizan y después junto con los balances de oxígeno y sustrato en la fase líquida y el balance de masa para los microorganismos se integran con el método implícito.

Se utilizaron los polinomios de Legendre para discretizar las ecuaciones por medio de colocación, las raíces son para dos puntos de colocación interiores:

$$x_1^* = 0.00, x_2^* = 0.21132, x_3^* = 0.78867, x_4^* = 1.00$$

La forma de cálculo de las concentraciones de oxígeno, sustrato y biomasa en todo el volumen de la película usando las funciones de peso.

A partir de la ecuación A.27 se calcularon las funciones de peso:

$$c_1 = 0.0, c_2 = 0.50, c_3 = 0.50, c_4 = 0.0$$

Entonces la concentración promedio para el sustrato se calcula de la siguiente forma:

$$S = \Delta x_1 (c_1 S_1^1 + c_2 S_2^1 + c_3 S_3^1 + c_4 S_4^1) + \Delta x_2 (c_1 S_4^2 + c_2 S_2^2 + c_3 S_3^2 + c_4 S_4^2)$$

donde Δx_1 y Δx_2 es el tamaño de los elementos. La colocación de los puntos para el método de colocación en elemento finito se calculan de la siguiente forma:

$$x_1 = x_1^*, x_2 = \Delta x_1 x_2^*, x_3 = \Delta x_1 x_3^*, x_4 = \Delta x_1 x_4^*, x_5 = x_4 + x_2, x_6 = x_4 + x_3, x_7 = x_4$$

APÉNDICE B

DATOS EXPERIMENTALES

En este apéndice se presentan los parámetros utilizados en las simulaciones realizadas en el capítulo 4 y se describe de forma muy general el reactor experimental (Chávez-Rivera, 1994), a partir del cual se tomaron los parámetros utilizados para las simulaciones presentadas.

B.1 Parámetros

- **TABLA B1.** Parámetros usados en común en todas las simulaciones

PARÁMETRO	VALOR	REFERENCIA
a_{vgl}	$36.0 \text{ m}^{-1} \text{ líquido}$	**
a_{vs}	$281.0 \text{ m}^{-1} \text{ sólido}$	**
D_{O_2, H_2O}	$2.1 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
D_{S, H_2O}	$2.72 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
F_g	$14.7 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ gas s}^{-1}$	**
H	$4.81 \times 10^9 \text{ Pa fracc. molar}^{-1}$	Perry (1973)

(Continuación... TABLA B1)

k_d	$4.65 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$	**
K_L	$0.00062 \text{ m}_{\text{liquido}}\text{s}^{-1}$	**
k_{ls}	$4.0 \times 10^{-5} \text{ m}_{\text{sólido}}\text{s}^{-1}$	Livingston (1989)
K_{O_2}	$2.6 \times 10^{-4} \text{ kg}_{O_2}\text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$	Wagner y Hempel, (1988)
K_S	$0.00173 \text{ kg}_S\text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$	**
MM_{H_2O}	18.0 kgmol^{-1}	Perry (1973)
O_{2l}	$7.55 \times 10^{-3} \text{ kgm}^{-3}_{\text{liquido}}$	Perry (1973)
O_{2gE}	$0.259 \text{ kgm}^{-3}_{\text{gas}}$	
O_{2lE}	$7.55 \times 10^{-3} \text{ kgm}^{-3}_{\text{liquido}}$	Perry (1973)
R	$8.3145 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$	Perry (1973)
$S_{m\acute{a}x}$	$0.120 \text{ kgm}^{-3}_{\text{liquido}}$	**
T	303 K	**
V_T	0.001178 m^3	**
Y_{X/O_2}	$0.197 \text{ kg}_{\text{biomasa}}\text{kg}^{-1}_{\text{oxigeno}}$	Wagner y Hempel, (1988)
$Y_{X/S}$	$0.052 \text{ kg}_{\text{biomasa}}\text{kg}^{-1}_{\text{sustrato}}$	**
ϵ_g	$0.03 \text{ m}^3_{\text{gas}}\text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$	Chávez-Rivera (1994), Shah et al., (1982)
ϵ_s	$0.34 \text{ m}^3_{\text{sólido}}\text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$	**
ϵ_l	$0.63 \text{ m}^3_{\text{liquido}}\text{m}^{-3}_{\text{reactor}}$	Chávez-Rivera (1994), Shah et al., (1982)
ρ_{H_2O}	1000.0 kgm^{-3}	Perry (1973)
$\mu_{m\acute{a}x}$	$1.7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$	Wagner y Hempel, (1988), Chávez-Rivera (1994)

PARÁMETROS ADIMENSIONALES

Parámetro	Valor	Ecuación
τ_1	2600.0	3.17b
K_L	139.5	3.17c
ϵ_{lg}	21.0	3.17d
K_{LS}	70.25	3.18c
ϵ_{sl}	0.539	3.18d
Y_{X/O_2}	0.188	3.20g
$Y_{X/S}$	0.01925	3.21g
K_{O_2}	0.001003	3.22c
K_S	0.0173	3.22d
k_d	0.2906	3.22e
H	0.02909	3.7

● TABLA B2. Parámetros del caso 1 (variación en el flujo de alimentación)

PARÁMETRO	VALOR	REFERENCIA
F_l	$1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3_{\text{liquido}} \text{ s}^{-1}$	**
λ	$150 \times 10^{-6} \text{ m}$	Skowlund (1990) Characklis (1983)
D_{ef,O_2}	$1.68 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
$D_{ef,S}$	$2.17 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
Bi_{O_2}	3.558	ec. 3.20e
Bi_S	2.757	ec. 3.21e

(Continuación... TABLA B2)

ϕ_{O_2}	0.002143	ec. 3.20f
ϕ_S	0.00165	ec. 3.21f

PSEUDO-ESTADO ESTACIONARIO	
O_{2g}^*	0.999305
O_{2l}^*	0.028460
O_2^*	0.025068
S_1^*	0.035883
S^*	0.005341
X^*	2.4355

• TABLA B3. Parámetros del caso 2 (variación en el flujo de alimentación)

PARÁMETRO	VALOR	REFERENCIA
F_l	$4.2 \times 10^{-8} \text{ m}^3 \text{ líquido s}^{-1}$	**
λ	$150 \times 10^{-6} \text{ m}$	Skowlund (1990) Characklis (1983)
D_{ef,O_2}	$1.68 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
$D_{ef,S}$	$2.17 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Livingston (1989), Wagner y Hempel, (1988)
Bi_{O_2}	3.558	ec. 3.20e
Bi_S	2.757	ec. 3.21e
ϕ_{O_2}	0.002143	ec. 3.20f
ϕ_S	0.00165	ec. 3.21f

(Continuación... TABLA B3)

PSEUDO-ESTADO ESTACIONARIO	
\dot{O}_{2g}	0.999706
\dot{O}_{2l}	0.028829
\dot{O}_2	0.027286
\dot{S}_l	0.019531
\dot{S}	0.006297
\dot{X}	1.00941

• TABLA B4. Variación en la relación difusividad-espesor de la película

PARÁMETRO	VALOR	REFERENCIA
F_l	$1.036 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \text{ líquido s}^{-1}$	**
λ	$150 \times 10^{-6} \text{ m}$	Skowlund (1990) Characklis (1983)
$0.5D_{ef,O_2}/\lambda$	$1.05 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	
$0.5D_{ef,S}/\lambda$	$1.36 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	
τ_2	0.8725	ec. 3.18b
$Bi_{O_2} (0.5D_{ef,O_2}/\lambda)$	5.6928	ec. 3.20e
$Bi_S (0.5D_{ef,O_2}/\lambda)$	4.4112	ec. 3.21e
$\phi_{O_2} (0.5D_{ef,O_2}/\lambda)$	0.00342	ec. 3.20f
$\phi_S (0.5D_{ef,O_2}/\lambda)$	0.00264	ec. 3.21f
$0.8D_{ef,O_2}/\lambda$	$1.68 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	
$0.8D_{ef,S}/\lambda$	$2.17 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	
$Bi_{O_2} (0.8D_{ef,O_2}/\lambda)$	3.558	ec. 3.20e
$Bi_S (0.8D_{ef,O_2}/\lambda)$	2.757	ec. 3.21e

(Continuación... TABLA B4)

$\phi_{O_2} (0.8D_{ef,O_2}/\lambda)$	0.002143	ec. 3.20f
$\phi_S (0.8D_{ef,O_2}/\lambda)$	0.00165	ec. 3.21f
$0.8D_{ef,O_2}/0.5\lambda$	$\lambda_s = 75 \times 10^{-6} \text{ m}$	
$0.8D_{ef,S}/0.5\lambda$	$\lambda_s = 75 \times 10^{-6} \text{ m}$	
$Bi_{O_2} (0.8D_{ef,O_2}/0.5\lambda)$	1.779	ec. 3.20e
$Bi_S (0.8D_{ef,O_2}/0.5\lambda)$	1.3785	ec. 3.21e
$\phi_{O_2} (0.8D_{ef,O_2}/0.5\lambda)$	5.357×10^{-4}	ec. 3.20f
$\phi_S (0.8D_{ef,O_2}/0.5\lambda)$	4.125×10^{-4}	ec. 3.21f

** Chávez-Rivera (1994)

B.2 Dimensiones y Características del Reactor Experimental

El reactor experimental es de tipo "air-lift", de estructura abierta para permitir la existencia de una buena transferencia de masa entre el seno del líquido y la película.

El empaque del reactor fue diseñado de tal forma que el flujo del líquido pudiera fluir lo mejor posible sin ser obstruido por el empaque, permitiendo la remoción de la biomasa desprendida. La función del empaque es proveer una extensa superficie para soportar la película biológica usada para el tratamiento de aguas residuales. Y al mismo tiempo proveer el flujo libre del sustrato y aire permitiendo la realización del proceso aeróbico y asegurar el máximo contacto entre la película activa y el líquido residual.

El empaque es de granulos de Celita[®], la cual está hecha a partir de trozos de roca sedimentaria compuesta de restos de algas unicelulares llamadas diatomas y de consistencia cercana a la sílice. El uso principal de la Celita[®] es como filtro debido a su alta porosidad y a su estructura no compresible, en este caso se uso como un perfecto soporte para la película microbiana.

El empaque utilizado consistió en 8 secciones finas de Celite[®], de forma similar a una estrella de punta redondeada y de aproximadamente 0.030 m de longitud. Cada unidad sirvió como bloque de construcción para formar columnas, las cuales permitieron que el reactor tuviera un área específica y canales rectos para el flujo del líquido. Cada columna se construyó uniendo varias unidades entre sí, uniendo 17 unidades con pegamento. El empaque fue hecho con una alta área específica y canales de tal forma que permitiese la circulación libre del líquido. Cuatro de estos bloques se introdujeron en un tubo Perspex[®] de un tubo de diámetro interno de 0.05m.

La aireación del reactor se logró colocando un difusor de vidrio poroso de forma cónica en la parte inferior del reactor. Este artefacto producía una intensa y homogénea mezcla debido a que se formaban burbujas de aire muy pequeñas, lo cual es ventajoso para la buena transferencia de oxígeno. También existía un tubo de succión que permitía mantener constante el nivel del líquido en el reactor. Un sistema de control de pH fue instalado para mantenerlo dentro de límites fijos.

Los microorganismos utilizados fueron provistos por una compañía industrial InterBio Ltd (UK), y vendida con el nombre de HAB, bacteria de halógenos aromáticos. La HAB está compuesta de cinco *Pseudomonas* sp., una *Klebsiella* sp., cuatro *Rhodococci* sp., y dos hongos, todos establecidos en una base cereal. El pH que soportan los microorganismos va de 6.8 a 7.2.

En resumen, el reactor consiste en una columna cilíndrica hecha de Perspex[®], 0.05 m de diámetro interno y de 0.65 m de largo, realizada de cuatro columnas, cada una de 17 unidades de Celite[®]. El total del área expuesta del empaque fue de 0.282 m², y su área específica de 281 m⁻¹ y su fracción de vacío de 0.62.

Para todos los experimentos el volumen del líquido fue de 700 a 750x10⁻⁶ m³ y el flujo del aire de 15.5x10⁻⁶ m³s⁻¹, equivalente a una velocidad superficial de 7.9x10⁻³ ms⁻¹.

B.3 Características Generales del Compuesto Xenobiótico

Los datos de la cinéticos que se utilizaron para realizar las simulaciones fueron de la 3,4-dicloroanilina. La 3,4-dicloroanilina, $C_6H_3 \cdot NH_2 \cdot Cl_2$, tiene un peso molecular de $162.02 \text{ kg kmol}^{-1}$. Tiene un punto de fusión de 70 a 72.5°C , un punto de ebullición de 272°C y una presión de vapor de 1 mmHg a 80.5°C . Es soluble en alcohol etílico y éter y ligeramente soluble en agua y benceno. La 3,4-dicloroanilina es una amina aromática halogenada que es usada como intermediaria en la producción de herbicidas y en menor escala en la producción de pigmentos azo y en la síntesis de compuestos farmacéuticos.

La 3,4-dicloroanilina es un compuesto xenobiótico, tóxico y que es resistente a la biodegradación. Su degradación es difícil por su estructura aromática y por los átomos de cloro que contiene.

El origen principal de la contaminación del agua con el 3,4-dicloroanilina es en su manufactura. En la práctica cada tonelada de 3,4-dicloroanilina producida genera aproximadamente 0.2 m^3 de agua del proceso químico y 0.4 m^3 de agua para su limpieza, lavado y servicios. Si se supone que la principal fuente de contaminación es el agua de los procesos químicos, es posible esperar un efluente con una concentración de 3,4-dicloroanilina de 0.200 a 0.250 kg m^{-3} .