



# Casa abierta al tiempo

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

División de Ciencias Biológicas y de la Salud

---

Modelado multiescala de un biorreactor de membrana  
para el tratamiento de aguas residuales con contenidos  
de grasas y aceites

Tesis de Maestría en Biotecnología

---

*IBT. Jessica Sánchez Vargas*



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA  
UNIDAD IZTAPALAPA**

**DIVISIÓN DE CIENCIAS BIOLÓGICAS Y DE LA SALUD**

**POSGRADO EN BIOTECNOLOGÍA**

---

---

**"Modelado multiescala de un biorreactor de membrana para el  
tratamiento de aguas residuales con contenidos de grasas y aceites"**

---

---

**TESIS**

**Que para obtener el grado de**

**MAESTRA EN BIOTECNOLOGÍA**

**PRESENTA:**

**IBT. Jessica Sánchez Vargas**

Co-Directores:

**Dra. Tania Lorena Volke Sepúlveda**

**Dr. Francisco José Valdés Parada**

Jurado:

**Dr. Sergio Antonio Gómez Torres**

**Dra. Gloria Maribel Trejo Aguilar**

**Dr. Sergio Alejandro Medina Moreno**

**Dra. Rosalinda Campuzano Ángeles**

Iztapalapa, Ciudad de México, 8 de junio de 2021

# **Agradecimientos**

La Maestría en Biotecnología de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, pertenece al Padrón Nacional de Posgrados de Calidad del CONACYT y cuenta con apoyo del mismo Consejo; por lo que agradece la beca No. 728330, recibida para el desarrollo de esta tesis.

# Agradecimientos personales

*A Mariano. Porque todo inició contigo, y hoy esto es para ti.*

*A Tania y Rosy. Porque a pesar de que el desafío fue grande, estuvieron conmigo.*

*A Paco. Porque más que a un asesor, encontré en ti a un amigo. Gracias por motivarme siempre a seguir, confiar en mí y nunca dejarme sola.*

*A Freslinda, Reyna y Arnulfo. Por siempre estar ahí para mí, por escucharme e inspirarme a seguir adelante y alcanzar mis metas. Gracias por creer en mis decisiones y apoyarme incondicionalmente en cada paso de mi camino.*

*A mis amigos: Sina, Arquí, Pau, Viri, Bris. Por brindarme su amistad, todo su apoyo, consejos y cariño.*

*A Abel. Por su cariño, apoyo constante, consejos y paciencia.*

El jurado designado por la  
**Comisión Académica del Posgrado en Biotecnología**  
de la Unidad Iztapalapa, aprobó la tesis que presentó

**IBT. JESSICA SÁNCHEZ VARGAS**

El día **01** de **febrero** del año **2021**

**Miembros del Jurado**

**Sergio Antonio Gómez Torres**

*Presidente*

**Gloria Maribel Trejo Aguilar**

*Secretario*

**Sergio Alejandro Medina Moreno**

*Vocal*

**Rosalinda Campuzano Ángeles**

*Vocal*



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

### ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00284

Matrícula: 2183801712

Modelado multiescala de un biorreactor de membrana para el tratamiento de aguas residuales con contenidos de grasas y aceites.



Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 16:00 horas del día 1 del mes de febrero del año 2021 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgra:

- DR. SERGIO ANTONIO GOMEZ TORRES
- DR. SERGIO ALEJANDRO MEDINA MORENO
- DRA. ROSALINDA CAMPUZANO ANGELES
- DRA. GLORIA MARIBEL TREJO AGUILAR

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretaria la última, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN BIOTECNOLOGIA  
DE: JESSICA SANCHEZ VARGAS

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

REVISO

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTORA DE LA DIVISION DE CBS

DRA. SARA LUCIA CAMARGO RICALDE

PRESIDENTE

DR. SERGIO ANTONIO GOMEZ TORRES

VOCAL

DR. SERGIO ALEJANDRO MEDINA MORENO

VOCAL

DRA. ROSALINDA CAMPUZANO ANGELES

SECRETARIA

DRA. GLORIA MARIBEL TREJO AGUILAR

El presente documento cuenta con la firma -autógrafa, escaneada o digital, según corresponda- del funcionario universitario competente, que certifica que las firmas que aparecen en esta acta - Temporal, digital o dictamen- son auténticas y las mismas que usan los c.c. profesores mencionados en ella

# Índice general

<b>I</b>	<b>Investigación documental</b>	
<b>1</b>	<b>Introducción</b> .....	<b>18</b>
<b>2</b>	<b>Antecedentes</b> .....	<b>20</b>
<b>2.1</b>	<b>Efluentes de la industria de alimento para mascota</b>	<b>20</b>
2.1.1	Características .....	20
2.1.2	Tecnologías de tratamiento .....	23
<b>2.2</b>	<b>Biorreactores de membrana: características y configuraciones</b>	<b>25</b>
<b>2.3</b>	<b>Modelado matemático de biorreactores de membrana</b>	<b>29</b>
2.3.1	Familia de modelos de lodos activados .....	31
2.3.2	Dinámica de fluidos computacional .....	35
2.3.3	Modelos integrados .....	39
2.3.4	Comparación de los métodos de modelado .....	42

## **II** Justificación, objetivos y metodología

<b>3</b>	<b>Justificación</b> .....	<b>45</b>
<b>4</b>	<b>Hipótesis</b> .....	<b>47</b>
<b>5</b>	<b>Objetivos</b> .....	<b>48</b>
5.1	Objetivo general	48
5.2	Objetivos particulares	48
<b>6</b>	<b>Metodología</b> .....	<b>49</b>
6.1	Descripción del sistema	49
6.2	Definiciones	50
6.3	Mecanismos de transporte en el MBR	52
6.3.1	Tanque aerobio .....	52
6.3.2	Tanque de membrana .....	55
6.4	Suposiciones iniciales	58
6.4.1	Para el modelo del tanque aerobio .....	58
6.4.2	Para el modelo del tanque de membrana .....	60
6.5	Metodología de escalamiento en el tanque aerobio	61
6.6	Metodología de escalamiento en el casete de ultrafiltración	62
6.7	Simulación numérica y análisis paramétrico	65

## **III** Resultados: Modelado matemático

<b>7</b>	<b>Escalamiento del tanque aerobio</b> .....	<b>68</b>
7.1	Promediado de las ecuaciones de transporte de masa total	69
7.1.1	Región- $\eta$ .....	69
7.1.2	Región- $\gamma$ .....	71
7.2	Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie A	73

<b>7.3</b>	<b>Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie <math>A</math> en la región-<math>\eta</math></b>	<b>76</b>
<b>7.4</b>	<b>Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie <math>B</math></b>	<b>78</b>
<b>7.5</b>	<b>Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie <math>B</math></b>	<b>81</b>
7.5.1	Fase- $\gamma$ . . . . .	81
7.5.2	Región- $\eta$ . . . . .	83
<b>7.6</b>	<b>Resumen de modelos macroscópicos</b>	<b>84</b>
7.6.1	Especie $A$ . . . . .	84
7.6.2	Especie $B$ . . . . .	88
<b>8</b>	<b>Escalamiento del tanque de membrana . . . . .</b>	<b>91</b>
<b>8.1</b>	<b>Promediado y escalamiento del flujo de fluidos</b>	<b>92</b>
8.1.1	Modelo para el flujo en la región- $\sigma$ del nivel de escala III . . . . .	92
8.1.2	Modelos de medio efectivo para el flujo en las regiones y fases del Nivel II . . .	93
<b>8.2</b>	<b>Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa de la especie <math>A</math></b>	<b>105</b>
8.2.1	Ecuaciones gobernantes a nivel de escala II . . . . .	106
8.2.2	Suavizado espacial . . . . .	108
8.2.3	Deducción del problema de las desviaciones . . . . .	113
8.2.4	Problemas de cerradura . . . . .	120
8.2.5	Modelo cerrado . . . . .	122
<b>8.3</b>	<b>Resumen de los modelos del tanque de membrana</b>	<b>125</b>
8.3.1	Transporte de masa total y cantidad de movimiento . . . . .	125
8.3.2	Transporte de masa de la especie $A$ . . . . .	126
8.3.3	Adimensionalización . . . . .	127

## IV

## Resultados: Simulaciones numéricas

<b>9</b>	<b>Análisis del tanque aerobio . . . . .</b>	<b>132</b>
<b>9.1</b>	<b>Análisis de la dinámica de la concentración de AGCL</b>	<b>132</b>
9.1.1	Delimitación de los parámetros en el modelo . . . . .	134

9.1.2	Estimación de la magnitud de cada efecto . . . . .	139
9.1.3	Condiciones finales para la simulación de la operación del tanque aerobio	141
9.1.4	Casos particulares de operación . . . . .	142
9.1.5	Distribución de tamaños de flóculo . . . . .	143
<b>9.2</b>	<b>Análisis de la dinámica de la concentración de oxígeno</b>	<b>145</b>
9.2.1	Delimitación de los parámetros en el modelo . . . . .	146
9.2.2	Estimación de la magnitud de cada efecto . . . . .	146
9.2.3	Condiciones finales para la simulación de la operación del tanque aerobio	148
9.2.4	Distribución de tamaños de flóculo . . . . .	150
<b>9.3</b>	<b>Resumen del capítulo</b>	<b>150</b>
<b>10</b>	<b>Análisis del tanque de membrana . . . . .</b>	<b>154</b>
<b>10.1</b>	<b>Simulación numérica de la mecánica de fluidos</b>	<b>155</b>
<b>10.2</b>	<b>Simulación numérica del transporte de masa de la especie A</b>	<b>158</b>
<b>10.3</b>	<b>Delimitación de los parámetros en el modelo</b>	<b>160</b>
10.3.1	Condiciones finales para la simulación . . . . .	164
<b>10.4</b>	<b>Modelo 3D del tanque de membrana</b>	<b>165</b>
10.4.1	Tiempos cortos de operación . . . . .	167
10.4.2	Transición . . . . .	169
10.4.3	Estado estacionario . . . . .	174
<b>10.5</b>	<b>Resumen del capítulo</b>	<b>180</b>
<b>V</b>	<b>Conclusiones, perspectivas y anexos</b>	
<b>11</b>	<b>Conclusiones . . . . .</b>	<b>184</b>
<b>12</b>	<b>Prospectivas . . . . .</b>	<b>188</b>
<b>13</b>	<b>Nomenclatura . . . . .</b>	<b>190</b>
	<b>Bibliografía . . . . .</b>	<b>194</b>
<b>A</b>	<b>Simulación del tanque aerobio - especie A . . . . .</b>	<b>209</b>

<b>B</b>	<b>Simulación del tanque aerobio - especie <i>B</i></b> .....	<b>213</b>
<b>C</b>	<b>Simulación del tanque de membrana</b> .....	<b>217</b>

## Abreviaturas

AGCL	Ácidos grasos de cadena larga
ASM	Modelo de lodos activados
BSM	Modelo de simulación de referencia
CFD	Dinámica de fluidos computacional
DAF	Flotación con aire disuelto
DQO	Demanda química de oxígeno
DBO	Demanda bioquímica de oxígeno
EPS	Sustancias poliméricas extracelulares
G&A	Grasas y aceites
MBR	Biorreactor de membrana
PTAR	Planta de tratamiento de aguas residuales
SMP	Productos solubles microbianos

## Resumen

Los efluentes de la industria de alimento para mascotas presentan contenidos grasos que los hacen difíciles de tratar. Los biorreactores de membrana representan una alternativa atractiva para el tratamiento de aguas residuales de industrias alimentarias. El modelado matemático de este tipo de sistemas es una herramienta práctica para el diseño, control y optimización de plantas de tratamiento. Entre los enfoques de modelado no existe un modelo matemático que tenga como característica el diseño específico para biorreactores de membrana y que capture la naturaleza jerárquica de estos sistemas. En este trabajo se desarrollan nuevos modelos matemáticos, a partir de las ecuaciones fundamentales de transporte de masa y cantidad de movimiento al nivel de escala del continuo. Mediante el uso del método del promedio volumétrico se deducen modelos de medio efectivo tanto para el tanque aerobio como para el tanque de membrana, los cuales son los componentes más importantes del sistema. Entre las características del enfoque de modelado usado aquí, se tiene la ventaja de que los coeficientes son predecibles, a partir de esquemas de cerradura, sin ser la solución de éstos computacionalmente demandante. Los modelos del biorreactor de membrana deducidos son deterministas, predicen las condiciones de diseño y operación más ventajosas, y permiten la simulación bajo condiciones específicas de operación, lo cual sirve como herramienta para analizar el impacto de cada parámetro sobre la concentración de ácidos grasos de cadena larga (AGCL) y oxígeno. Adicionalmente, las simulaciones numéricas de los modelos dan lugar al entendimiento

---

de los mecanismos de transporte de masa involucrados en el tanque de membrana, mediante la predicción de la velocidad del fluido, de la dinámica del flux total de masa y de la concentración en cada punto del tanque. En el tanque aerobio se identifican como parámetros determinantes, para el transporte y oxidación de AGCL, el área interfacial por unidad de volumen y a la proporción de microorganismos dentro de éstos que oxidan a esta especie química. Mientras que para el transporte de oxígeno reflejan la importancia del flujo volumétrico de aire del reactor y la tasa de consumo de este sustrato sobre la concentración de oxígeno disuelto. No se encontró limitación de oxígeno bajo las condiciones que favorecen la degradación de AGCL. Se definen las mejores condiciones de diseño en cuanto a: áreas interfaciales por unidad de volumen, constantes cinéticas, fracciones volumétricas. Así también se reportan las mejores condiciones de operación: flujos volumétricos de aire y alimentación y números de Biot. Para el tanque de membrana, los factores que más influyen en el transporte de AGCL son: la capacidad retentiva de la membrana de ultrafiltración y la velocidad del fluido contenido en el tanque. En la mayor parte del fluido externo a los conjuntos de módulos de membrana (casetes), el transporte de masa está regido principalmente por la convección, mientras que en los casetes el transporte es predominantemente difusivo. Para este tanque se reportan las mejores condiciones de diseño en términos de las fracciones volumétricas; y las mejores condiciones de operación en términos de los números de Biot y el número de Péclet. Estas aportaciones son relevantes para trabajos experimentales futuros, tanto en cuestiones de diseño como para la proposición de potenciales mejoras a sistemas existentes.

## Abstract

Pet food wastewaters contain considerable amounts of oils and greases, which make them difficult to treat. Membrane bioreactors represent an attractive alternative for food industries' wastewater treatment. Mathematical modeling of this type of system is a practical tool for the design, control and optimization of wastewater treatment plants. Among the modeling approaches, there is no mathematical model that is specifically designed for membrane bioreactors, and that captures the hierarchical nature of these systems. In the present work, new mathematical models are developed, from the fundamental equations for mass and momentum transport at the level of the continuum. With the use of the volume averaging method, effective medium models for both the aerobic and membrane tanks, which are the most important components of the system, were developed. Among the characteristics of the modeling approach used here, it has the advantage that its coefficients can be predicted from closure schemes, without representing a demanding computational effort. The membrane bioreactor models deduced here are deterministic and predict the most favorable design and operating conditions through numerical simulation, making them useful as a tool for analyzing the effect of each parameter over the LCFA and oxygen concentrations. Additionally, numerical simulations of these models give rise to a better understanding of the involved mass transport mechanisms in the membrane tank, this is achieved through the prediction of the fluid velocity, and the dynamics of the total mass flux and the concentration at each point in

the tank. In the aerobic tank, the identified determining parameters, for the transport and oxidation of LCFA, were the interfacial area per unit volume and the proportions of microorganisms inside of them that oxidize this chemical species. While for oxygen transport they reflect the importance of the volumetric air flow of the reactor and the consumption rate of this substrate on the dissolved oxygen concentration. No oxygen limitation was found under the conditions that favor LCFA degradation. The best design conditions are defined in terms of: interfacial areas per unit volume, kinetic constants and volumetric fractions. Similarly, better operating conditions are also reported: volumetric feed and air flows and Biot numbers. For the membrane tank, the most influential factors for the transport of LCFA are the retentive capacity of the ultrafiltration membrane and the velocity of the fluid contained in the tank. In most of the fluid external to the membrane modules assembly (cassettes), the mass transport is governed mainly by convection, while in the cassettes, transport is predominantly diffusive. For this tank, better design conditions are reported in terms of volume fractions; and better operating conditions are given in terms of the Biot numbers and the Péclet number. These contributions are relevant for future experimental works, both for design activities and for the proposition of improvements to existing systems.



# Investigación documental

<b>1</b>	<b>Introducción .....</b>	<b>18</b>
<b>2</b>	<b>Antecedentes .....</b>	<b>20</b>
2.1	Efluentes de la industria de alimento para mascota	
2.2	Biorreactores de membrana: características y configuraciones	
2.3	Modelado matemático de biorreactores de membrana	

# 1. Introducción

Los biorreactores de membrana han surgido como alternativa atractiva para el tratamiento de aguas residuales de industrias alimentarias (Judd, 2010), incluyendo la manufactura de alimento para mascotas, la cual se caracteriza por su contenido orgánico y lipídico (Nakhla y *col.*, 2006). En los últimos años se han desarrollado modelos matemáticos con el objetivo de simular el transporte y reacción en las fases y regiones involucradas en los biorreactores de membrana, con miras a la optimización del diseño y operación de plantas de tratamiento (Hamedi y *col.*, 2019).

Existen dos principales acercamientos para el modelado de estos reactores: el uso de modelos de lodos activados y la aplicación de la dinámica de fluidos computacional. Los primeros aportan información sobre el desempeño del sistema únicamente al nivel de escala del reactor. Los segundos modelan el flujo de fluidos y el transporte de masa al nivel de escala del continuo (microescala). Ambos enfoques tienen fortalezas y debilidades. Debido a su simpleza matemática, los modelos de lodos activados son fáciles de utilizar, pero deben ser adaptados para incorporar la separación física debido a la membrana de ultrafiltración, lo cual se ha llevado a cabo de manera heurística (Naessens y *col.*, 2012a,b). Además, las diferencias operativas entre el sistema de lodos activados y los biorreactores de membrana (Metcalf y Eddy, 2003; Itokawa y *col.*, 2008) ponen en duda su aplicabilidad. Por el contrario, los modelos de dinámica de fluidos computacional, aportan más información de la requerida en aplicaciones industriales a un considerable costo computacional

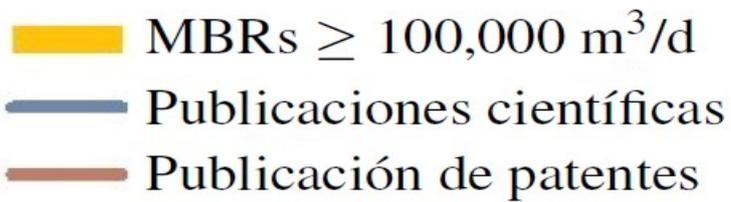
---

(Saalbach y Hunze, 2008; Xiea y *col.*, 2016), lo cual puede restringir su aplicación.

Lo anterior motiva a desarrollar nuevos modelos matemáticos diseñados específicamente para biorreactores de membrana. Es deseable que, además de que sean aplicables al nivel de escala del reactor, estos nuevos modelos también sean capaces de capturar la información esencial de la microescala. Esto permite superar las más importantes desventajas de los acercamientos antes descritos, y forma parte de las aportaciones de este trabajo. Aquí se deducen modelos matemáticos para describir el transporte de masa y reacción tanto en el tanque aerobio como en el de membrana presentes en MBR. Ambos modelos se formularon a partir del promediado y escalamiento de las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa y cantidad de movimiento en la microescala, utilizando el método del promedio volumétrico.

La ventaja de los modelos deducidos, con respecto a otros que han sido postulados, es que permiten identificar con claridad las suposiciones involucradas. Además, posibilitan la predicción de los diferentes coeficientes involucrados en los mismos a través de la solución de los problemas de cerradura asociados. Los modelos matemáticos deducidos permiten simular la operación del biorreactor bajo condiciones específicas. Más aún, es posible identificar los parámetros que tienen mayor repercusión sobre el consumo de AGCL y oxígeno, y así determinar las condiciones de diseño y operación más favorables para llevar a cabo el proceso de tratamiento de aguas residuales.

Para el desarrollo de este trabajo, el documento se organiza como sigue: en el capítulo 2 se presenta una revisión bibliográfica acerca del modelado de biorreactores de membrana. A raíz de esta revisión, queda clara la justificación del trabajo (capítulo 3), lo cual lleva consecuentemente a la hipótesis y objetivos del trabajo, los cuales se presentan en los capítulos 4 y 5. Más adelante, en el capítulo 6 se detalla la metodología a seguir para llevar a cabo tanto el modelado como las simulaciones numéricas correspondientes a los dos tanques del MBR. El desarrollo de los modelos se detalla en los capítulos 7 y 8, mientras que la solución de los mismos se reporta en los capítulos 9 y 10, respectivamente. Para finalizar el documento, las conclusiones y prospectivas correspondientes se encuentran en los capítulos 11 y 12, respectivamente.



## 2. Antecedentes

El objetivo de este capítulo es introducir al lector al contexto que permite y promueve el desarrollo de este trabajo. Esto se plantea en una secuencia lógica que va de lo general a lo particular, con el fin de, en última instancia, dar paso a la justificación del trabajo. Esta revisión se organiza en tres secciones: En la sección 2.1 se aborda una breve revisión sobre el tamaño, impacto y características de las aguas residuales generadas por la industria alimentaria que produce alimento para mascota. Así también, se resumen algunos de los acercamientos que se reportan para el tratamiento de estos efluentes, y entre los que se incluyen los biorreactores de membrana. En la sección 2.2, se describen las características y configuraciones de estos biorreactores, aplicados al tratamiento de aguas residuales. En la sección 2.3 se explican los principales tipos de modelado matemático aplicados a biorreactores de membrana, haciendo énfasis en dos principales vertientes que se encuentran reportadas en la literatura.

### 2.1 Efluentes de la industria de alimento para mascota

#### 2.1.1 Características

En el año 2017 se produjo en México un total de un millón de toneladas de alimento para mascota, con un crecimiento anual de 5.9% con respecto a la producción en 2016 (Wall, 2018; Alltec, 2019). El creciente mercado, principalmente nacional, ha generado que la cantidad de

alimento producido, así como la cantidad de empresas productoras vaya en aumento; se reporta un incremento de 16 a 124 compañías productoras del año 2007 al 2017 (INEGI, 2017; Statista, 2018). La producción de alimento para mascota en México se encuentra acaparada en su mayoría por dos empresas: Mars Incorporated y Nestlé S.A., las cuales producen 35.3 % y 21 %, respectivamente (Clipsham, 2018) y quienes operan principalmente en Querétaro y la Ciudad de México, respectivamente.

Además de consumir recursos hídricos nacionales, las industrias que manufacturan alimento para mascotas generan enormes volúmenes de aguas contaminadas. Los efluentes contienen un alto contenido de grasas y aceites (G&A), llegándose a medir concentraciones de hasta  $114\text{g L}^{-1}$  (Jeganathan y *col.*, 2006). Estas concentraciones representan un problema debido a que generan la obstrucción de tuberías y drenajes al solidificar (Brooksbank y *col.*, 2006). Además, representan una fuente de contaminación al suelo y aguas debido a la alta demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y demanda química de oxígeno (DQO) que presentan (Mobarak-Qamsari y *col.*, 2012), la DQO puede llegar a  $101\text{g L}^{-1}$  (Jeganathan y *col.*, 2006). Aunado a esto, altos contenidos de G&A en aguas residuales industriales generan serios desafíos para los sistemas de tratamiento biológico de estos efluentes. En la Tabla 2.1 se presentan las características de diferentes aguas residuales antes de su tratamiento, provenientes de industrias que producen alimento para mascota. Como se puede apreciar, todos los efluentes contienen concentraciones de grasas y aceites superiores a las máximas permitidas ( $21\text{mg L}^{-1}$ ) por el proyecto de norma PROY-NOM-001-SEMARNAT-2017 (SEMARNAT, 2018), el cual sustituiría a la NOM-001-SEMARNAT-1996 y que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales.

Los efluentes de la industria de alimento para mascota están compuestos por G&A, contenidos en la grasa animal de los ingredientes utilizados y de las coberturas grasas que se adicionan, así como de los procesos de lavado del equipo, maquinarias, pisos, etc. (Wang y *col.*, 2005). La fuente más significativa de agua residual se origina por el lavado de vísceras de pollo para remover restos de estiércol, así como por la limpieza de recipientes de almacenamiento y transporte, y en menor cantidad por el lavado de los instrumentos de cocción, mezcladoras, trituradoras y emulsionantes (Nakhla y *col.*, 2003). El alimento contiene, entre otras cosas, carne animal y/o subproductos de cárnicos, los cuales tienen gran cantidad de grasa (Satriajaya, 2017). Los principales constituyentes de la grasa animal son los triglicéridos, que consisten en cadenas lineales de ácidos grasos unidos

Tabla 2.1. Características de aguas residuales de la industria de alimento para mascota.

Parámetro (mg L <sup>-1</sup> )	Jeganathan y col. (2006)	Liu y col. (2004)	Jeganathan y col. (2007)	Acharya y col. (2006a)	Nakhla y col. (2006)	Acharya y col. (2006c)
<b>DQO total</b>	87,480	96,660	54,900±7,700	20,303±8,167	77,300	96,660
<b>DQO soluble</b>	51,240	16,757	22,700±3,700			
<b>G&amp;A</b>	83,000	38,800	22,500±4,700	8,000	13,500	30,000
<b>SST</b>	82,250	36,857	39,200±4,000	4,545±5,468	14,460	36,857
<b>SSV</b>	51,250	34,383	20,200±4,400		13,870	34,383
<b>Amonio (NH<sub>3</sub>-N)</b>	1,353	328		1,139±342	1,350	1,500
<b>Fosfato (PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>)</b>	286	665		208±69	290	665
<b>Nitrato</b>	40					
<b>Sulfato</b>	322					
<b>AGCL</b>		2,500±900				
<b>AGV</b>	3,200		14,900±4,100			
<b>pH</b>	6.7	6.7±0.3				

como ésteres a una molécula de glicerol (Wakelin y Forster, 1997). Entre los ácidos grasos lineales se puede encontrar la composición que muestra la Tabla 2.2. De estos valores, es evidente que el alimento para mascotas está compuesto principalmente por ácidos grasos de entre 12 y 18 carbonos (Fernández y col., 2005; Orsavova y col., 2015).

Tabla 2.2. Principales ácidos grasos en el alimento para mascota.

Ácido graso	Laúrico (C12:0)	Mirístico (C14:0)	Palmítico (C16:0)	Estearico (C18:0)	Oleico (C18:1)	Linoleico (C18:2)	Otros AGCL <sup>a</sup> (< 1%)
Porcentaje	0.2	2.2	32.9	14.9	33.8	5.6	10.4

<sup>a</sup> Ácidos Grasos de Cadena Larga

Se utilizan principalmente dos tipos de tratamiento para los efluentes ricos en G&A: fisicoquímicos y biológicos. Entre estos, el enfoque biológico adquirió mayor atención en años recientes debido a las estrictas regulaciones ambientales; la aplicación de microorganismos convierte los residuos lipídicos contaminantes en dióxido de carbono, agua y biomasa (Lefebvre y col., 1998). Sin embargo, no es raro encontrar una combinación de varios métodos de tratamiento en un mismo tren de tratamiento para las aguas residuales. Dependiendo de las características del efluente, se establecen las operaciones unitarias requeridas para cumplir con la legislación vigente (Santonja y col., 2019). Para aguas residuales con G&A, las plantas de tratamiento suelen utilizar operaciones unitarias río arriba, generalmente de naturaleza fisico-química, para disminuir la cantidad de G&A a

tratar en el biorreactor (Khuntia y *col.*, 2020). Las propiedades de las grasas son aprovechadas para su separación mediante tecnologías tales como: trampas de grasa manuales y mecánicas, flotación con aire disuelto, desnatador de grasa hidrofóbico, coagulación química, tratamiento enzimático, entre otros (Wallace y *col.*, 2017; Changmai y *col.*, 2019).

### 2.1.2 Tecnologías de tratamiento

Las opciones de tratamiento de los efluentes de industrias que producen alimento para mascotas se han descrito desde hace varias décadas, siendo el sistema de lodos activados el primero en ser reportado y patentado para este fin (Metcalf y Eddy, 2003). Este sistema tiene su origen en el año de 1913 y consiste en el uso de una masa activada de microorganismos creciendo en forma suspendida, capaz de degradar componentes de un agua residual en condiciones aeróbicas (Metcalf y Eddy, 2003). Sin embargo, debido a la alta carga orgánica de estos efluentes, se han estudiado alternativas para su tratamiento. Además, a lo largo de los años, los estándares para efluentes de aguas residuales se han hecho cada vez más estrictos (Smith y *col.*, 2019). Hasta el año de 1970, la regulación se limitaba a restringir el contenido de DBO, organismos patógenos y SST; sin embargo, a partir de entonces otros componentes de las aguas residuales comenzaron a ser objeto de regulación, tales como el contenido de nitrógeno y fósforo (Metcalf y Eddy, 2003). Actualmente, las G&A y DQO son especialmente reguladas en efluentes de la industria alimentaria (FAO, 2003; Zhou y *col.*, 2018).

Posterior al tratamiento mediante un digester anaerobio, Nakhla y *col.* (2003) proponen la adición de un biosurfactante de origen vegetal para aumentar la remoción de G&A por la técnica de flotación con aire disuelto (DAF) en aguas residuales con altas concentraciones de G&A ( $38.8 \text{ g L}^{-1}$ ). En el digester anaerobio se logra la reducción de 60-70% del contenido de G&A hasta un contenido promedio de  $13.5 \text{ g L}^{-1}$ , mientras que con DAF como tratamiento terciario, se obtiene un efluente con  $0.668 \text{ g L}^{-1}$  de G&A.

Liu y *col.* (2004b) estudiaron la degradación de aguas residuales con alto contenido de G&A y alta DQO mediante el tratamiento con lodos activados no aclimatados a altos contenidos de G&A a nivel laboratorio (4 L). Ellos reportan una eficiencia de remoción de DQO mayor a 90% con concentraciones de G&A iniciales de hasta  $0.66 \text{ g L}^{-1}$  utilizando un tiempo de residencia de 5 días. Mientras que para concentraciones mayores de G&A ( $13.5 \text{ g L}^{-1}$ ) y alta DQO ( $77.3 \text{ g L}^{-1}$ ), se logra una remoción de entre 63.7 y 76.2% de la DQO soluble con tiempos de residencia de 5 días. Para disminuir la concentración de G&A y DQO soluble, se utilizó un pretratamiento consistente

en un digester anaerobio (para alcanzar una concentración inicial de  $13.5 \text{ g L}^{-1}$  de G&A), y un digester anaerobio + DAF (para obtener la concentración inicial de  $0.66 \text{ g L}^{-1}$ ) de acuerdo con la concentración inicial a probar en el sistema de lodos activados. Basado en el trabajo anterior, Liu y *col.* (2004a) instalaron un sistema para tratar de forma aerobia el efluente previamente tratado mediante un digester anaerobio seguido de DAF. El sistema aerobio consistió en dos reactores de lodos activados de 28L y un clarificador de 10 L. El efluente crudo contenía en promedio  $38.8 \text{ g L}^{-1}$  de G&A, el cual, al ser pretratado por el digester anaerobio se redujo hasta  $13 \text{ g L}^{-1}$ , durante la flotación con aire disuelto se eliminó 95.1 % de las G&A hasta  $0.64 \text{ g L}^{-1}$ , en el primer tanque de lodos activados se logró una remoción de 98.1 % (obteniéndose concentraciones de  $0.012 \text{ g L}^{-1}$ ) mientras que en el segundo tanque de lodos, la degradación fue de 25 %, obteniéndose un efluente cuyo contenido de G&A fue  $0.009 \text{ g L}^{-1}$ .

Kurian y *col.* (2005) propusieron una alternativa al tren de tratamiento propuesto por Liu y *col.* (2004a) mediante el uso de un sistema DAF seguido de un biorreactor de membrana operado a temperatura ambiente ( $20^\circ\text{C}$ ) y condiciones ligeramente termofílicas ( $45^\circ\text{C}$ ) a nivel laboratorio y con tamaño de poro de la membrana de  $0.2 \mu\text{m}$ . El agua residual cruda contenía concentraciones promedio de  $38.8 \text{ g L}^{-1}$  de G&A y, al ser tratada por DAF, la concentración disminuyó hasta  $1.23 \text{ g L}^{-1}$ , y se alimentó al biorreactor de membrana (MBR). Se consiguieron eficiencias de remoción de G&A de alrededor del 98 % para el MBR a temperatura ambiente y entre 66 y 86 % para el MBR termofílico. Este último generó además un efluente con altas concentraciones (50-73 % de la DQO total) de ácidos grasos volátiles, esto debido probablemente a la filtración de esta fracción grasa a través de la membrana al operar a altas temperaturas.

A pesar de los altos costos operativos y de capital de un digester anaerobio de  $1800 \text{ m}^3$  existente en una empresa canadiense que produce alimento para mascotas, éste no generó la calidad de efluente deseada y falló en presencia de altas concentraciones de G&A. Debido a esto, Acharya y *col.* (2006c) desarrollaron un tratamiento alternativo y novedoso para tratar el efluente pretratado por DAF para cumplir con los criterios de descarga establecidos en la normatividad vigente, considerando las grandes variaciones en las cargas orgánicas y de nutrientes de este tipo de aguas. Para esto, se usó un MBR de dos etapas, el cual consistió en dos tanques aireados de 27 L, donde cada uno poseía una membrana de ultrafiltración (tamaño de poro de  $0.04 \mu\text{m}$ ) y que operaban en serie. La concentración promedio del agua residual cruda fue  $38.8 \text{ g L}^{-1}$  de G&A (con variaciones de entre 30 y  $82 \text{ g L}^{-1}$  de G&A), mientras que posterior al pretratamiento por DAF, el contenido

de G&A fue  $0.436 \text{ g L}^{-1}$ . Este estudio demostró que los contaminantes orgánicos eran removidos principalmente en la primera etapa del sistema de MBR, seguido por una casi completa remoción de amonio en la segunda etapa. A pesar de un aumento en la DQO poco biodegradable en la segunda etapa, se logró una remoción de SST, DBO soluble, DQO y amonio de 100, 99.9, 95.2, y 99.7%, respectivamente. Con esto, el MBR surge como una herramienta prometedora para cumplir con los criterios de descarga de efluentes. Posteriormente, Acharya y *col.* (2006a) y Acharya y *col.* (2006b) realizaron una mejora del sistema, incorporando una zona anóxica dentro del primer tanque del MBR, logrando así una mejor operación del segundo tanque. Además se adicionó  $\text{FeCl}_3$  como floculante, con el objetivo de reducir la fracción particulada de la DQO. Además, se analizó la variación de la concentración de G&A en el caudal de entrada al sistema, donde se observó estabilidad durante el tratamiento del agua residual con hasta poco más de  $5 \text{ g L}^{-1}$  de G&A, y donde en la primera etapa del reactor se logró disminuir esta concentración hasta  $0.01\text{-}0.015 \text{ g L}^{-1}$  de G&A. Todo esto con una concentración de sólidos suspendidos del licor mezclado dentro del sistema de entre  $30$  y  $35 \text{ g L}^{-1}$ .

Actualmente, la Directiva de emisiones industriales de la Comisión Europea recomienda el sistema de lagunas aireadas para el tratamiento de este tipo de efluentes, así como lodos activados para el tratamiento de efluentes diversos provenientes de la industrias que procesan cárnicos o sus derivados (Santonja y *col.*, 2019), tal como es el caso de la producción de alimento para mascota. Sin embargo, este documento contempla la filtración por membrana únicamente como una operación unitaria, mas no como parte de un biorreactor. Esto puede deberse a que a pesar de que la cantidad de biorreactores de membrana a nivel industrial ha tenido un acelerado crecimiento en los últimos años (Xiao y *col.*, 2019), aún sigue siendo un sistema de tratamiento minoritario con respecto a la diversidad de tecnologías en funcionamiento. Países europeos y asiáticos que han adoptado el uso de MBR (China, Japón, Italia, España, Grecia, Chipre, Israel, entre otros) generalmente promueven un estricto control sobre la calidad del efluente de las plantas de tratamiento, además de que el incumplimiento provoca medidas financieras punitivas (Judd, 2010; Krzeminski y *col.*, 2017; Smith y *col.*, 2019).

## 2.2 Biorreactores de membrana: características y configuraciones

Un biorreactor de membrana (MBR) es una tecnología surgida para el tratamiento de aguas residuales que integra un proceso de separación física de tipo sólido-líquido con un proceso

biológico. Para el caso de biorreactores de membrana aerobios, el proceso biológico consiste en un sistema de lodos activados (Judd, 2010). Un diagrama de este tipo de reactores puede ser apreciado en la Figura 6.1.

El MBR supera muchos de los inconvenientes de los lodos activados y presenta una serie de ventajas en comparación con otros sistemas de tratamiento aerobios. El efluente generado puede alcanzar muy buena calidad por la casi completa retención de sólidos debido a la presencia de la membrana de ultrafiltración. Por las altas concentraciones de lodos con las que opera, de entre 7 y 13.5 g L<sup>-1</sup> (Itokawa y *col.*, 2008), es capaz de tratar grandes cargas volumétricas con buena eficiencia de remoción de contaminantes. Este tipo de reactores opera a tasas de retención hidráulica más cortas y tasas de retención de sólidos más largas (15 a 40 días) que el sistema de lodos activados (3 a 15 días) (Metcalf y Eddy, 2003; Itokawa y *col.*, 2008). Además, los MBR poseen potencial para llevar a cabo la nitrificación y desnitrificación simultánea por operar a largas tasas de retención de sólidos.

La Figura 2.1 muestra el tren de tratamiento para aguas residuales al utilizar a) el sistema de lodos activados y b) un MBR. El sistema de lodos activados incluye a un tanque aerobio y a un sedimentador que retiene a la biomasa flocular y demás partículas que, por su tiempo de sedimentación, puedan ser separadas en esta operación unitaria. Para la completa retención de sólidos y mejora de la calidad del agua tratada, un sistema de filtración posterior suele ser incorporado al tren de tratamiento. Se puede notar también que el MBR incorpora tanto al sistema de lodos activados como al proceso de filtración con membrana. La incorporación de la membrana al proceso biológico en el MBR elimina la necesidad de un sedimentador final. A su vez, la eliminación de estos sedimentadores y la operación a cortos tiempos de retención hidráulica resulta en una huella ecológica<sup>1</sup> significativamente menor (de menos del 50% que aquella requerida por un sistema de lodos activados) por el menor espacio requerido para la operación de la planta (Singh, 2005). Además, en comparación con el sistema de lodos activados, los MBR son capaces de eliminar no sólo los sólidos en suspensión, sino también microorganismos patógenos de los efluentes, debido al tamaño de corte de las membranas utilizadas (Judd, 2010; Iorhemen y *col.*, 2016; Hamza y *col.*, 2016; Goli y *col.*, 2019).

A pesar de lo anterior, el control del ensuciamiento e incrustaciones en la membrana del MBR

---

<sup>1</sup>En aguas residuales se interpreta como la extensión terrestre requerida para llevar a cabo el tratamiento, y se relaciona con la eficiencia del sistema de tratamiento.

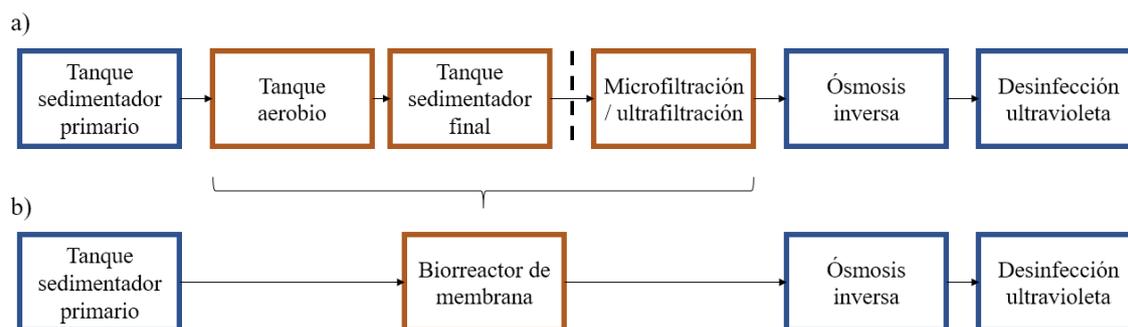


Figura 2.1. Esquema de un tren de tratamiento de aguas residuales por medio de: sistema de lodos activados a), MBR b) (Judd, 2010).

sigue siendo la principal desventaja de este tipo de biorreactores. Esto genera la reducción del flux de permeado<sup>2</sup>, menor rendimiento de la membrana, la necesidad de realizar operaciones de limpieza y finalmente conlleva a un aumento en los costos de operación y mantenimiento del sistema (Iorhemen y *col.*, 2016; Goli y *col.*, 2019).

Los biorreactores de membrana se han utilizado exitosamente para el tratamiento de aguas residuales tanto municipales como industriales muy diversas. Tan sólo en Japón se tiene registro de 1610 instalaciones hasta marzo del 2009 (Judd, 2010). La principal aplicación de los MBR en plantas de tratamiento de agua residual (PTAR) es la industria de alimentos, seguida por las granjas ganaderas y la industria médica; éstas representan alrededor del 33 %, 18 % y 14 % del número total de instalaciones, respectivamente (Figura 2.2).

La investigación y puesta en marcha de plantas de tratamiento que utilizan MBR presenta un crecimiento constante en los últimos años (Figura 2.3) (Krzeminski y *col.*, 2017). La publicación de artículos científicos en el tema inició a principios de los años 90, y para el año 2017 el número total de artículos alcanzó los 4500. La misma tendencia se puede observar para la publicación de patentes, que comenzó a principios de los 2000. En cuanto a aplicaciones de ingeniería, las plantas de tratamiento de aguas residuales que utilizan esta tecnología son cada vez más grandes, pudiéndose encontrar hoy en día plantas que superan la capacidad de  $100,000 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$ , principalmente en China, Estados Unidos y Europa (Xiao y *col.*, 2019). La planta de tratamiento Tuas Water Reclamation Plant en Singapur, es actualmente la más grande en construcción, la cual se espera comience operaciones en 2025 y sea capaz de tratar  $1,200,000 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$  (datos obtenidos de <http://www.thembrsite.com/>, revisado el 29 de enero de 2021).

<sup>2</sup>Flujo de masa a través de una superficie por unidad de tiempo por unidad de área.

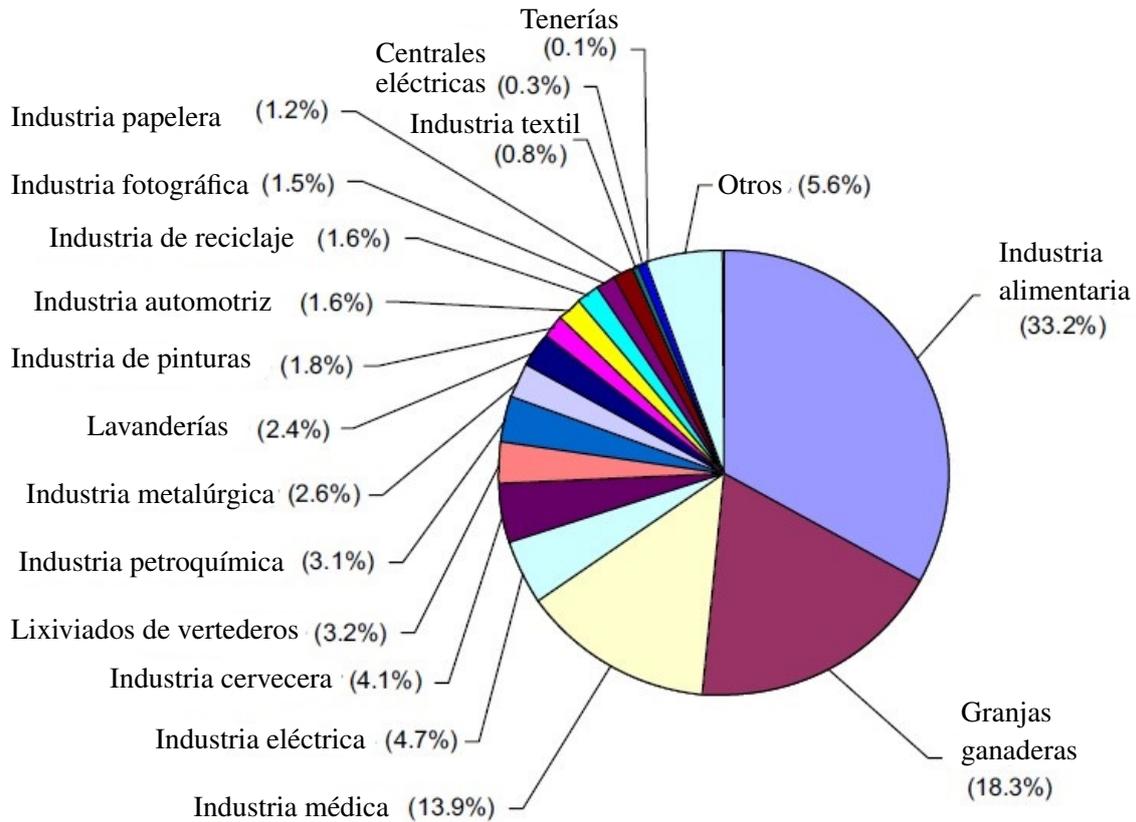


Figura 2.2. Distribución de plantas de tratamiento de aguas residuales con tecnología MBR por proceso productivo en Japón (Judd, 2010).

Existen dos tipos principales de configuración de los MBR, con membrana sumergida o de flujo lateral. La configuración sumergida aplica presión de succión al módulo de la membrana para la filtración dentro del tanque de lodos activados o en un tanque separado, mientras que el MBR de flujo lateral usa una bomba adicional para crear un flujo cruzado en la superficie de la membrana, colocada de forma externa al tanque de lodos (Gukelberger y *col.*, 2019). La más utilizada es la configuración sumergida, ya que presentan menor demanda energética específica. Esto hace a los MBR de membrana sumergida los más viables económicamente hablando, especialmente para aplicaciones a gran escala (Judd, 2010). Esta configuración puede operarse con dos tipos principales de membranas: fibras huecas y hoja plana. Para aplicaciones a gran escala, los módulos de fibras huecas son los más utilizados (Xiao y *col.*, 2019), esto debido a que son generalmente menos costosos de fabricar, permiten una alta densidad de empaquetamiento y son muy resistentes a los retrolavado utilizados para la limpieza de la membrana (Judd, 2010).

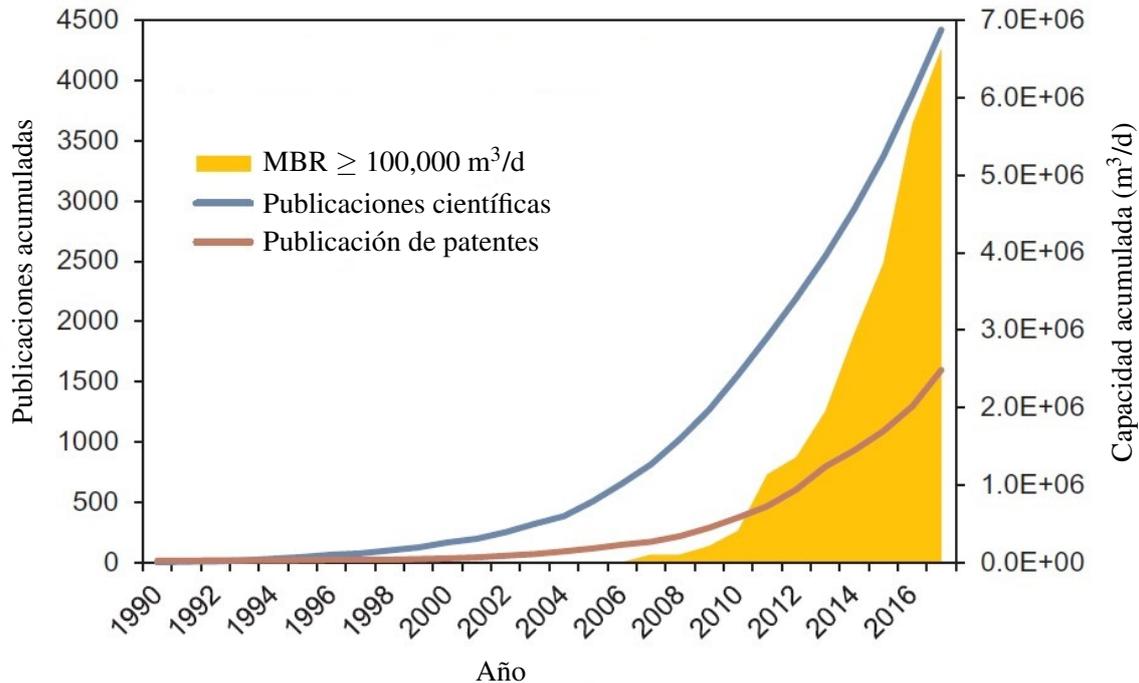


Figura 2.3. Desarrollo a nivel mundial de la publicación de artículos, publicación de patentes y la capacidad instalada de plantas de tratamiento con MBR de tamaño  $\geq 100\,000\text{ m}^3/\text{d}$  (Xiao y *col.*, 2019).

### 2.3 Modelado matemático de biorreactores de membrana

El mercado y aplicación de biorreactores de membrana se encuentra en constante crecimiento y la investigación al respecto se ha incrementado considerablemente, pudiéndose encontrar diversas configuraciones. A la par, se han desarrollado nuevos modelos matemáticos con el objetivo de simular tanto la fase biológica como física de estos reactores, con miras a la generación de herramientas que permitan optimizar el diseño y operación de plantas de tratamiento (Hamedi y *col.*, 2019). El modelado matemático de los procesos de tratamiento de aguas residuales es una herramienta, que desde principios de siglo, ha sido aceptada en la práctica y es ampliamente utilizada por empresas consultoras y agencias reguladoras (Morgenroth y *col.*, 2002).

El desarrollo de modelos matemáticos para los procesos que se llevan a cabo dentro de los reactores de membrana cobra importancia por el hecho de que, tanto el diseño racional de estos equipos como el de sus respectivos sistemas de control, requieren cierto conocimiento de la dinámica del sistema a utilizar y de sus limitaciones. Los modelos se pueden utilizar para establecer criterios de diseño y funcionamiento para las PTAR, lo cual resulta en operaciones más eficientes y efectivas (Brannock y *col.*, 2010a). Así también, se utilizan para identificar dificultades operativas que permitan tomar acciones preventivas y correctivas. Los modelos matemáticos son útiles para

determinar los límites operativos de las instalaciones existentes, y permiten optimizar el proceso de forma sencilla (Rittmann y *col.*, 2018). Además, presentan la ventaja de no requerir la existencia física del sistema bajo estudio, y de reducir el número de experimentos necesarios para entender el sistema, por lo que el modelado matemático es un acercamiento muy utilizado para el diseño de los sistemas de tratamiento de aguas residuales (Zarragoitia-González y *col.*, 2008).

Existen dos principales acercamientos para llevar a cabo el modelado matemático de un sistema: modelos *basados en la observación* y modelos *basados en principios fundamentales* (Valdés Parada, 2014). El primer tipo de modelos requiere que los experimentos sean reproducibles, y se centra en el uso de parámetros ajustables a partir de datos experimentales. Este acercamiento es relativamente fácil y no requiere mucho conocimiento del sistema en estudio, pues no suelen estar respaldados por teoría. Estos modelos serán más o menos aceptables de acuerdo con el grado de concordancia entre las predicciones que ofrecen y los datos experimentales. En caso de que el modelo seleccionado no represente correctamente al sistema en estudio, puede descartarse y seleccionarse otro, o se puede incrementar el número de parámetros ajustables para obtener mayor grado de similitud con lo experimental (Valdés Parada, 2014). Este modelado funciona bien para gran cantidad de sistemas, hay muchos más que no pueden ser descritos por estos ajustes (Rittmann y *col.*, 2018). Otra desventaja de este acercamiento es que proporciona muy poca o nula información sobre el comportamiento físico del sistema en cuestión (Valdés Parada, 2014).

El uso de modelos basados en principios fundamentales para la representación de fenómenos físicos permite afirmar que todo sistema puede ser descrito de forma precisa por un modelo matemático. Este tipo de modelos surge de la necesidad de explicar los fenómenos que ocurren en el sistema, y será aceptable dependiendo de dos factores: su capacidad de reproducir los resultados experimentales, y el grado de explicación del sistema que proporcionen los fundamentos teóricos propuestos (Valdés Parada, 2014).

Para los MBR, existen dos principales aproximaciones para el modelado del sistema. Por un lado, se encuentran los modelos de lodos activados (ASM por sus siglas en inglés); modelos observacionales, ampliamente difundidos, mecanísticos, que parten de ecuaciones de balance y que involucran el ajuste de parámetros cinéticos con datos experimentales para poder ser aplicados. Por otro lado, la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés), la cual genera modelos basados en ecuaciones fundamentales, y que conlleva simulaciones numéricas complejas (Xiea y *col.*, 2016). A continuación se describen ambas aproximaciones, así como variaciones de

estas dos principales vertientes.

### 2.3.1 Familia de modelos de lodos activados

En 1983, la entonces Asociación internacional de Investigación y Control en la Contaminación del Agua (ahora conocida como Asociación Internacional del Agua o IWA por sus siglas en inglés), formó un grupo de investigación para diseñar un modelo práctico del diseño y operación de procesos de tratamiento de aguas residuales. El producto de este grupo fue la generación del modelo de lodos activados no. 1 (ASM1), introducido en 1987 (Jeppsson, 1996). Desde entonces, gran cantidad de variaciones han surgido tomando como base a dicho modelo, como ejemplo se tiene al ASM1, ASM2, ASM2d, ASM3, entre otros. Estos modelos intentan representar las transformaciones bioquímicas en lodos activados a través de varias descripciones simplificadas de procesos, basados en la dinámica observada en PTAR (Hauduc *y col.*, 2012).

A pesar de que los ASM fueron desarrollados para lodos activados convencionales, varios autores señalan que podría utilizarse para modelar las cinéticas de la biomasa en sistemas de MBR (Lu *y col.*, 2001; Lee *y col.*, 2002; Maere *y col.*, 2011; d'Antonio *y col.*, 2016; Janus *y Ulanicki*, 2016; Tenore *y col.*, 2018). Esto debido a que el sistema MBR se ha considerado básicamente como un sistema de lodos activados en el cual el clarificador secundario fue reemplazado por una filtración por membrana.

Los ASM son modelos biocinéticos deterministas cuyas ecuaciones fueron desarrolladas a partir de ecuaciones de balance general y que buscan modelar, entre otras cosas, la remoción de nutrientes de las aguas residuales a través de fenómenos de hidrólisis, crecimiento y decaimiento de organismos (Jiang, 2007; Hauduc *y col.*, 2012). Esto resulta en un conjunto de ecuaciones diferenciales presentadas en una forma matricial (matriz de Gujer o matriz de Petersen) (Hauduc *y col.*, 2012). El uso de los ASM permite el modelado a nivel de reactor de reacciones biológicas: oxidación de carbono, nitrificación y desnitrificación (Fenu *y col.*, 2010). Estos modelos consideran múltiples parámetros, cuyos valores dependen de las condiciones de operación bajo las cuales fueron estimados (Jeppsson, 1996), por lo que para ser aplicados deben ser validados con datos experimentales mediante el ajuste del valor de los parámetros.

Las diferentes versiones de los modelos de lodos activados han sido aplicadas a biorreactores de membrana. La literatura describe dos principales formas de aplicar estos modelos, las cuales conllevan diferentes grados de modificación a los modelos originales:

1. Modelo de lodos activados modificado.
2. Modelo de lodos activados expandido.

A continuación se describe cada uno de estos acercamientos, así como sus características principales y su aplicabilidad.

#### **Modelo de lodos activados modificado**

Fenu y *col.* (2010) realizaron una revisión exhaustiva de la literatura y reportaron gran cantidad de estudios donde se utiliza cualquiera de los modelos ASM para el modelado de un sistema MBR. Algunas modificaciones ligeras son llevadas a cabo con el fin de generar mejores concordancias entre el modelo y los datos experimentales. También se ha buscado expandir la descripción de variables de estado ya existentes en el ASM, con el fin de evitar la incorporación de variables adicionales. Sin embargo, los autores recalcan el hecho de que los ASM estándar consideran por defecto algunos valores para los parámetros del modelo, los cuales provienen de amplia experimentación con lodos activados tanto a nivel laboratorio como a nivel de planta de tratamiento. La inclusión de una membrana al sistema de lodos activados genera inevitablemente modificaciones a estos parámetros debido principalmente a cuestiones operativas diferentes entre ambos sistemas (Tabla 2.3). Como se puede notar, el tiempo de retención de los lodos es mayor para biorreactores de membrana, al igual que la concentración de lodos a la que opera el sistema, esto se debe principalmente a la presencia del medio filtrante, el cual retiene a la biomasa junto con el resto de los lodos dentro del tanque del reactor. La presencia de mayores concentraciones de biomasa permite operar a mayores cargas volumétricas. Sin embargo, la presencia de la membrana genera problemas que el sistema de lodos activados no presenta, siendo el principal la acumulación de productos microbianos en la superficie de la misma. Además, debido justamente a la presencia de la membrana, los MBR requieren de mayores tasas de aireación, suministradas desde el inferior de cada casete, con el objetivo de prevenir el ensuciamiento de la membrana y con ello el incremento de los costos de mantenimiento de la misma. Es importante notar que la discrepancia entre ambos sistemas pone en duda la idoneidad de un ASM para representar con exactitud los fenómenos que se llevan a cabo dentro del biorreactor de membrana.

Tratando de adaptar los ASM de mejor manera, se ha tomado un segundo acercamiento que incluye la adición de una gran variedad de submodelos al modelo de lodos activados original. A este proceso se le denomina expansión del ASM, y tiene el objetivo de involucrar en el modelo de

Tabla 2.3. Diferencias operativas entre el sistema de lodos activados y el biorreactor de membrana.

<b>Lodos activados</b> (Metcalf y Eddy, 2003)	<b>Biorreactor de membrana</b> (Itokawa y col., 2008)
Tiempos de retención de lodos: 3-15 d	Tiempos de retención de lodos: 15-40 d
Tiempo de retención hidráulico: 3-5 h	Tiempo de retención hidráulico: 2.8-8.1 h
Concentración de lodos: 1.5-4 g L <sup>-1</sup>	Concentración de lodos: 7-13.5 g L <sup>-1</sup>
Acumulación de productos microbianos rechazados durante el proceso de filtración.	
Mayores tasas de aireación para revoque de torta de filtrado.	

lodos activados a las principales diferencias operativas entre este sistema y el MBR.

### Modelo de lodos activados expandido

La segunda alternativa para modelar a los MBR mediante el uso de un ASM es la incorporación de subsistemas que consideran fenómenos que se llevan a cabo en el biorreactor de membrana pero no así en el sistema de lodos activados. Esta incorporación busca compensar las carencias del ASM para modelar un sistema al que se le ha integrado una membrana de ultrafiltración y todos los problemas operacionales que éste conlleva. Los submodelos más reportados pueden clasificarse en tres principales categorías de acuerdo al tipo de fenómeno que estudian (Naessens y col., 2012a,b):

1. Biológicos: Principalmente para productos microbianos solubles y/o sustancias poliméricas extracelulares.
2. De filtración: Flux, permeabilidad, revoque de suciedad de la membrana, formación de torta, obstrucción de poros, etc.
3. Hidrodinámicos: Turbulencia, esfuerzo cortante, etc.

A continuación se describen algunos de los submodelos más reportados.

#### *Modelos SMP/EPS*

La más notable diferencia entre un sistema de lodos activados y un biorreactor de membrana es la presencia de un medio filtrante que actúa como mecanismo de separación entre el permeado y todo aquello retenido en el reactor. El tamaño de poro de las membranas suele encontrarse alrededor de 0.04  $\mu\text{m}$  (GE, 2014), lo que significa que todas las partículas con tamaño mayor quedarán retenidas en el tanque, esto incluye bacterias, materia orgánica, sólidos, sustancias producto del

metabolismo bacteriano (polisacáridos y proteínas), etc. La retención de los anteriores es una peculiaridad de los sistemas MBR, por lo que los ASM son incapaces, por sí mismos, de evaluar el efecto de la acumulación de estos elementos.

Los productos microbianos solubles (SMP) se definen como componentes celulares o *debris* liberados durante el metabolismo de sustratos (usualmente con el crecimiento de biomasa) y de la lisis celular. Éstos están presentes en el efluente de las aguas residuales pero no en el influente (Ng y Kim, 2007). Las sustancias poliméricas extracelulares (EPS) son una mezcla de proteínas, polisacáridos, lípidos, DNA y ácidos húmicos que rodean a las células creando una matriz (Fenu y *col.*, 2010), las cuales al desprenderse y solubilizarse son consideradas parte de los SMP (Do y Schmitt, 2020). La presencia de SMP en el permeado es perjudicial para el proceso de tratamiento de aguas residuales, así como para los procesos de tratamiento subsecuentes, además de que la acumulación de SMPs puede causar una reducción en la permeabilidad de la membrana (Ng y Kim, 2007) por la constricción y obstrucción de poros y por formación de torta en la superficie del medio filtrante.

Por las razones antes descritas, existen estudios donde se extiende alguno de los modelos de lodos activados con un modelo de formación y degradación de SMP/EPS para el modelamiento de los biorreactores de membrana (Lu y *col.*, 2001; Oliveira-Esquerre y *col.*, 2006; Janus y Ulanicki, 2015; Tenore y *col.*, 2018). Estos modelos adoptan la forma matricial del ASM.

Con respecto a la extensión de los ASM, Fenu y *col.* (2010) concluyen que el uso de una expansión por medio de la incorporación de un submodelo de tipo EPS/SMP sólo está justificada si se persigue alguno de los siguientes objetivos:

1. Vincular los procesos biológicos celulares con el ensuciamiento.
2. Las predicciones de la demanda química de oxígeno soluble en el sistema completo.
3. El modelado de casos con altos tiempos de retención de lodos.

La razón es que, si no es necesario, la incorporación de estos conceptos genera dificultades en la calibración de los parámetros recién introducidos.

#### *Modelos de ensuciamiento de la membrana*

Como en la mayoría de los procesos de filtración por membrana, el ensuciamiento de la membrana y su control es un problema importante que podría limitar la aplicación de este sistema a gran escala. Cuando el objetivo es el modelado para la optimización operativa, no se debe pasar por

alto el proceso de ensuciamiento (Naessens y *col.*, 2012a).

El ensuciamiento se refiere a la acumulación no deseada de sustancias en la membrana de filtración, llegando a obstruir el flujo a través de la membrana, esto genera un descenso en el flux de permeado y un aumento en la presión transmembranal. Además de que esto puede dañar la membrana, genera costos adicionales durante la operación del MBR. El ensuciamiento se puede dar por dos principales mecanismos, un mecanismo interno en el cual partículas más pequeñas que los poros de la membrana se acumulan y obstruyen o constriñen los poros de la membrana, y un mecanismo externo en el cual las partículas rechazadas por la membrana se acumulan en su superficie dando lugar a tortas de filtración (Zuthi y *col.*, 2017).

Existe una gran cantidad de modelos reportados para el proceso de filtración de los MBR. Busch y *col.* (2007) desarrollaron un modelo sobre la geometría del sistema, la hidrodinámica de la alimentación y del flujo de permeado y la resistencia a la filtración. El modelo de resistencia considera la resistencia de la membrana, la obstrucción de los poros, la formación de la torta, las partículas polidispersas, la formación de biopelículas y la polarización de la concentración. Zuthi y *col.* (2017) reportan un modelo matemático semi-empírico de ensuciamiento de la membrana que explica la formación de la torta en la membrana y la obstrucción de los poros como los principales procesos de ensuciamiento; esto considerando el efecto combinado de la aireación y el retrolavado sobre el desprendimiento de las incrustaciones de la membrana. De igual forma se puede revisar el trabajo de Liang y *col.* (2006) para el modelado del subsistema de filtración para biorreactores de membrana que ha sido validado con datos experimentales. La extensión de un ASM con modelos de filtración puede ser revisada en los trabajos de Lee y *col.* (2002) y Wintgens (2003).

A pesar de la popularidad de los modelos clásicos y extendidos de esta familia, en la literatura, también se pueden encontrar modelos de filtración e hidrodinámica desarrollados mediante el uso de dinámica de fluidos computacional, dichos desarrollos se detallan a continuación.

### 2.3.2 Dinámica de fluidos computacional

La dinámica de fluidos computacional es una herramienta que, con la ayuda de computadoras y utilizando análisis numérico, realiza predicciones cuantitativas a problemas que involucran flujos de fluidos. Está basada en las leyes de conservación (de masa, cantidad de movimiento y energía mecánica) que gobiernan el movimiento de fluidos (Hu, 2012). Los métodos de CFD se enfocan en la solución de ecuaciones que describan el flujo de un fluido, así como su interacción con cuerpos

sólidos, aunque también es común usar este término para referirse a simulaciones numéricas de la transferencia de calor y masa al nivel de escala del continuo.

Esta herramienta se ha utilizado para modelar diferentes escalas de los MBR, desde subsistemas que posteriormente pueden ser acoplados con los ASM, hasta modelar el tanque y membrana de filtración o hasta el reactor completo. Además, dentro de los subsistemas modelables con CFD se puede hacer la diferencia entre modelos hidrodinámicos, de filtración, de tamaño de partícula, de geometría o biocinético. Estos últimos se diferencian de los modelos biocinéticos del ASM en que se enfocan en el transporte de especies o en las fuentes y sumideros biológicos pero no detallan como tal el consumo de nutrientes.

Debido a la importancia de la aireación en los MBR, normalmente se utilizan modelos CFD multifase, los cuales incluyen el modelado de las fases gaseosa y líquida. Estos modelos permiten la estimación de los diferentes fenómenos que tienen lugar mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales acopladas que describen el flujo multifásico. Los modelos de CFD se aproximan mediante ecuaciones algebraicas y se resuelven de forma numérica. Para ello, se crea una malla computacional, que sirve como una discretización espacial del dominio computacional donde se resolverá el modelo (Naessens y *col.*, 2012b).

Para describir los fenómenos que se llevan a cabo en la microescala de la membrana de filtración se requiere de una malla computacional con un número considerable de elementos computacionales para alcanzar convergencia, en especial en zonas estrechas del sistema, como el interior de las fibras que componen los casetes de filtración (ver Figura 6.6). De hecho una complicación adicional en esta porción del MBR es su naturaleza jerárquica (ver Figura 6.7) como se discute a detalle en capítulos posteriores. Conforme se va escalando el modelo, se deben realizar aproximaciones de los fenómenos que ocurren a microescala, así se mantiene el número de elementos dentro de límites computaciones viables (Saalbach y Hunze, 2008).

Se debe recalcar que la simulación mediante CFD es sólo una herramienta para analizar problemas de flujo de fluidos. Ésta puede proporcionar gran cantidad de información, pero es fácil que se use indebidamente o incluso abusar de ella. Un desconocimiento de las ecuaciones que se resuelven o sobre el método para resolver los cálculos pueden tener como consecuencia una confianza sin fundamento en el resultado que arroja la computadora (Wicklein y *col.*, 2015). Es importante siempre considerar las suposiciones usadas para producir los resultados de un modelo de CFD (Hu, 2012).

### Aplicación de modelos CFD a los biorreactores de membrana

En esta sección se describen brevemente algunos ejemplos donde se aplica CFD para el modelado de subsistemas, tanque de membrana y para el biorreactor de membrana completo. Aunque el número de referencias es mucho mayor, aquí se mencionan solo algunos trabajos representativos a cada nivel de modelado.

Las condiciones hidrodinámicas que tienen lugar en la región cercana a la superficie de la membrana de filtración en un MBR juegan un papel importante en el control del ensuciamiento del medio filtrante. Normalmente, desde la parte inferior del tanque donde se localiza la membrana de filtración se burbujea aire, que en combinación con el líquido que allí se encuentra incrementa el esfuerzo de corte cerca de la membrana. Este mecanismo tiene como objetivo la remoción de depósitos adheridos a la superficie de la membrana, además de la prevención de la deposición de cualquier tipo de elemento que pueda ensuciar la membrana y provocar su obstrucción (Ratkovich *y col.*, 2012). La efectividad de la aireación dependerá a su vez de factores geométricos del MBR, como las dimensiones del tanque, la separación de los aspersores con respecto a los módulos de filtración y la separación entre membranas adyacentes, entre otros (Liu *y col.*, 2018). Para el modelado de este tipo de fenómenos hidrodinámicos se ha recurrido al uso de modelos de CFD.

Ratkovich *y col.* (2012) se enfocaron en esclarecer los mecanismos de ensuciamiento para el desarrollo de estrategias de aireación enfocadas a la reducción de costos pero sin la necesidad realizar múltiples ensayos experimentales. Estos autores concluyeron que el modelo propuesto genera resultados comparables contra datos experimentales a esfuerzos de corte bajos y moderados. Liu *y col.* (2018) se enfocaron al diseño y operación de los módulos de la membrana de ultrafiltración para optimizar el gasto de aire y a su vez reducir los costos de operación. Este modelo fue validado con resultados experimentales y se reportan parámetros óptimos de diseño y operación.

El modelado de las condiciones hidráulicas en el tanque de la membrana o de filtración es importante para optimizar la posición de los módulos de membrana y el diseño del módulo, la posición y el tipo de elementos de aireación, así como el flujo de aire, y la geometría y el diseño del propio tanque de filtración (Saalbach y Hunze, 2008). La vida útil de la membrana se puede prolongar operando por debajo de su flux crítico; por debajo de este flux la resistencia al flujo se rige por la membrana en lugar de por la resistencia de la torta de filtración. Boyle-Gotla *y col.* (2014), tomaron la capacidad de la CFD para predecir resultados a partir de diferentes condiciones de operación, para predecir las condiciones a las cuales se llegaba al flux crítico. Esto con el fin

de restringir las condiciones de operación y evitar ensuciamiento excesivo de la membrana que pudiera repercutir en la continua operación del reactor de membrana.

A pesar de que los trabajos mencionados limitan el modelo sólo para la membrana de filtración, también existen numerosos ejemplos de modelados donde el enfoque no es sólo un componente, sino el reactor completo. Saalbach y Hunze (2008) presentan un modelo que permite una aproximación del campo de flujo dentro de los MBR. Este modelo se aplica para dos ejemplos de plantas de tratamiento existentes y considerando los dos tipos de membrana que estos reactores tienen: módulos de fibra hueca o de hoja plana. Además del desarrollo de un modelo nuevo, este estudio investiga la posibilidad de modelar los casetes de membrana como zonas de medios porosos, considerando al módulo completo como una zona con características macroscópicamente idénticas. Los autores reportan buena similitud entre las estimaciones proporcionadas por el modelo y los datos experimentales obtenidos a partir de dos plantas de tratamiento de aguas residuales que operan MBR. Esto quiere decir que el modelo explica la mayor parte de la variación en los datos experimentales, atribuyendo un bajo porcentaje de la variación al error.

Brannock y *col.* (2010b) se basan en resultados previos (Wang y *col.*, 2009) para presentar un modelo que utiliza CFD para el modelado del tanque completo del MBR, con una membrana en configuración sumergida, el cual tiene en cuenta a la aireación, la reología del lodo y la geometría tanto del tanque como del módulo de filtración. El modelo propuesto se compone de un modelo hidrodinámico central para las fases líquida y gaseosa, junto con ecuaciones de transporte para los lodos y especies. Este modelo se resolvió bajo características de dos MBR a gran escala y se validó exitosamente contra datos experimentales.

Amini y *col.* (2013) realizaron simulaciones de modelos de CFD de dos y tres fases para investigar el efecto del diámetro de la burbuja, la concentración de lodos, la tasa de aireación y la presencia de biomasa, sobre la hidrodinámica y el rendimiento de un MBR con membrana de hoja plana. Se reportan condiciones óptimas de operación para limitar el ensuciamiento de la membrana, entre las que se incluye el tamaño crítico de partícula bajo el cual el rendimiento del proceso se ve afectado por la reducción del flux de permeado. Los resultados de la simulación se validaron con datos experimentales.

### 2.3.3 Modelos integrados

Se consideran modelos integrados aquellos que hacen uso de múltiples submodelos tanto para la parte biológica como para la parte física que conforman al sistema biorreactor. El objetivo de éstos es generar un modelo que represente de mejor manera los fenómenos que tienen lugar dentro del biorreactor de membrana, considerando que juegan un papel importante tanto los modelos biológicos, como los de filtración e hidrodinámicos para describir a un MBR. A continuación se describen algunos ejemplos de ellos. Es importante recalcar que la extensión de los modelos de lodos activados conlleva la introducción de una gran cantidad de parámetros adicionales, generando un problema de sobreparametrización (Takács y *col.*, 2011). Entre más subsistemas se incorporen, este problema será cada vez mayor, hasta producir la inviabilidad de validar y aplicar los modelos para aplicación en plantas de tratamiento de aguas residuales. Además, en algunas ocasiones la extensión del modelo de lodos activados no considera la relación entre los submodelos o interfases (Janus y Ulanicki, 2016).

#### Familia de modelos de simulación de referencia

El amplio uso de la familia de modelos de lodos activados también ha llevado al desarrollo de herramientas como la familia de Modelos de Simulación de Referencia (BSM por sus siglas en inglés). Estos modelos de referencia son procedimientos de simulación estandarizados, los cuales se utilizan para el diseño y evaluación de estrategias de control para plantas de tratamiento de aguas residuales convencionales que operan con un sistema de lodos activados (Maere y *col.*, 2011). Existe variedad de BSM, como por ejemplo el BSM1, BSM1-LT, BSM2 y BSM-MBR.

El BSM1 describe una planta de tratamiento de aguas residuales con un diseño específico, compuesta por cinco reactores de lodos activados convencionales (dos tanques anóxicos y tres aerobios) y un clarificador secundario. Este entorno de simulación estandarizado utiliza un ASM1 para representar las reacciones biológicas que se llevan a cabo en el sistema. Además, comprende un sistema de control cuyo objetivo es controlar el nivel de oxígeno disuelto en el compartimento final del reactor mediante la manipulación del coeficiente de transferencia de oxígeno y controlar el nivel de nitrato en el último tanque anóxico al manipular el caudal de recirculación (Alex y col., 2018). El BSM1 es capaz de evaluar el desempeño en un periodo de una semana, e involucra concentraciones y flujos volumétricos de los influentes, procedimientos de prueba con parámetros establecidos, criterios de evaluación de la calidad del efluente, cantidad de lodos producidos y costos operativos por requerimientos energéticos de los equipos utilizados (Jeppsson y col., 2006).

El BSM1-LT está basado en el BSM1 pero difiere en que considera tiempos de evaluación mucho más largos (609 días). Mientras que el BSM2 incluye al BSM1 pero considera además el tratamiento de los lodos (Alex y col., 2018).

Así como en el caso de los ASM, los BSM también han sido utilizados para el modelamiento de plantas de tratamiento que incluyen biorreactores de membrana. Esto se logra mediante la adaptación del modelo. Maere y col. (2011) desarrollan justamente una adaptación del BSM1, al que denominan modelo estandarizado de referencia para biorreactores de membrana (BSM-MBR). La adaptación llevada a cabo incluye modificación en volúmenes de los reactores, flujos de bombeado de lodos y filtración por membranas para la separación de lodos del efluente del sistema. Para poder evaluar el rendimiento se incorporaron equipos adicionales como bombas para el proceso de filtración y aireación para prevenir el ensuciamiento de la membrana, considerando a la vez los efectos de la operación con altas concentraciones de lodos. Así como el BSM1 permite comparar estrategias de control y operación entre plantas de tratamiento que operan con un sistema de lodos activados, el BSM-MBR permite realizar estas comparaciones en términos de calidad del efluente y costos de operación cuando el sistema en uso corresponde a un biorreactor de membrana. Las simulaciones numéricas del BSM-MBR predicen que se generan efluentes con mejor calidad con respecto al BSM1, principalmente debido a la retención de sólidos por la membrana de filtración; sin embargo, reflejó un aumento en el costo operacional por consumo energético debido a la inclusión de las bombas, aunque estos resultados al ser comparados con datos experimentales de tres MBR a gran escala demuestran ser realistas.

**Modelo integrado de biorreactor y ensuciamiento de membrana para biorreactores de membrana (IBMF-MBR)**

Janus (2014); Janus y Ulanicki (2015, 2016) presentan un modelo integrado de un biorreactor de membrana sumergida para el tratamiento de aguas residuales. Al modelo lo conforman tres submodelos publicados anteriormente que describen al biorreactor, la membrana y la interfaz entre ellos, logrando la vinculación entre todos los subsistemas. El submodelo de biorreactor extiende un ASM incorporando un modelo de SMP/EPS que generan incrustaciones irreversibles y reversibles, capaz de predecir las concentraciones tanto de polímeros solubles como de polímeros ligados mientras que mantiene la estructura del ASM1. El modelo de membrana describe el ensuciamiento en función de las concentraciones de biopolímero, el flujo de permeado, y el esfuerzo cortante en la superficie de la membrana; en este submodelo el ensuciamiento irreversible es causado por SMP, mientras que el ensuciamiento reversible se acelera por la presencia de EPS, lo cual conduce a un aumento en la resistencia específica de la torta en la membrana. Además, el desprendimiento de la torta depende de la tasa de revoque del aire de acuerdo con la relación entre el esfuerzo cortante y la velocidad superficial del gas. La interfase describe la dependencia de la tasa de transferencia de oxígeno debido a las concentraciones de sólidos suspendidos y calcula los esfuerzos cortantes en la superficie de la membrana a partir de las tasas de socavación de aire. Es importante mencionar que el diseño de la planta, los escenarios de simulación, las entradas y los esquemas de control utilizados en las simulaciones se basan en el modelo de simulación de referencia BSM-MBR reportado por Maere *y col.* (2011), donde se modificaron o adicionaron variables de acuerdo con el modelo planteado, y se realizó una comparación entre el modelo BSM-MBR y el IBMF-MBR. Las simulaciones mostraron discrepancias no significativas entre ambos modelos; sin embargo, el IBMF-MBR proporciona información adicional sobre la producción de biopolímeros y el ensuciamiento de la membrana en comparación con el modelo de Maere *y col.* (2011).

Mannina *y col.* (2018) desarrollaron un modelo que comprende una parte biológica y otra física, donde se llevó a cabo la integración de los diferentes submodelos y se redujo el número de parámetros mediante un análisis de sensibilidad. Este modelo está basado en trabajos previos donde se fueron desarrollando y acoplando los submodelos (Mannina *y col.*, 2011; Mannina y Bella, 2012; Mannina y Cosenza, 2015). La parte biológica describe los procesos clave de eliminación de nutrientes y carbono según el enfoque del ASM2d, acoplado a un modelo de generación/degradación de SMP e incluye también un submodelo para la emisión de gases de

efecto invernadero y la producción de óxido nitroso debido a la presencia de bacterias oxidantes de amonio y debido al proceso de nitrificación/desnitrificación. Por su parte, el submodelo físico describe los principales procesos que ocurren durante la separación física con una membrana y que afectan directa o indirectamente al submodelo biológico. Esto incluye el ensuciamiento reversible de la membrana, la formación de la torta en la superficie de la membrana, el espesor de ésta última, así como la obstrucción de poros mediante un modelo de resistencias en serie. Para este modelo se realizó un análisis de sensibilidad global a fin de seleccionar los factores más importantes del modelo que debían ser calibrados posteriormente. Es importante mencionar que además de incluir la integración entre los submodelos biológicos y físicos, el problema de sobreparametrización se atenúa debido al análisis de sensibilidad.

#### 2.3.4 Comparación de los métodos de modelado

Como se describe en la sección previa, existen dos grandes vertientes para el modelado de biorreactores de membrana. La primera es a través de modelos macroscópicos basados en ecuaciones de balance de materia, como el modelo de lodos activados y sus variantes, los cuales tienen la ventaja de ser relativamente fáciles de utilizar, y donde el desafío yace en la integración de los múltiples submodelos requeridos para poder modelar un biorreactor de membrana. A pesar de que con este acercamiento de modelado es posible representar sistemas biorreactores que integran un medio filtrante, el problema de sobreparametrización que se genera por la integración de gran cantidad de submodelos persiste. Esto genera modelos poco aplicables y que dependen del ajuste de los parámetros que involucra. Adicionalmente, el modelo resultante será específico para las condiciones de diseño y operación utilizadas para el ajuste de los parámetros que contiene.

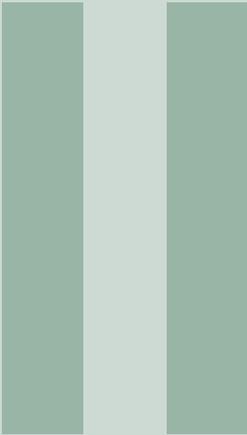
Por otro lado se tiene a los modelos a partir de dinámica de fluidos computacional. Si bien estos son capaces de aportar una gran cantidad de información debido a que resuelven las ecuaciones fundamentales a nivel de continuo, esto requiere de poder de cómputo significativamente grande y de tiempos demandantes, lo cual termina limitando su aplicación. Debido a la forma de solución de los problemas por dinámica de fluidos computacional, estos modelos no requieren el ajuste de una gran cantidad de parámetros como los modelos de lodos activados. Sin embargo, este acercamiento de modelado está principalmente enfocado a la parte hidrodinámica del MBR y requiere ser complementado con otros modelos, entre ellos los de lodos activados, para poder modelar la dinámica completa que tiene lugar dentro de un biorreactor de membrana para el

tratamiento de aguas residuales.

En la Tabla 2.4, se resumen las principales ventajas y desventajas de estos dos acercamientos al modelado de biorreactores de membrana. La revisión de la literatura presentada en este capítulo deja ver la pertinencia de desarrollar modelos matemáticos aplicables al nivel de escala del reactor pero que también sean capaces de capturar la información esencial de la microescala. Esta es precisamente una de las principales aportaciones de este trabajo y se desarrolla a detalle más adelante.

Tabla 2.4. Comparación entre el modelado utilizando a la familia de modelos de lodos activados y dinámica de fluidos computacional.

<b>Modelo de lodos activados</b>	<b>Dinámica de fluidos computacional</b>
Modelo a nivel de reactor	Modelo a nivel del continuo
Relativamente fácil de modelar	Aporta gran cantidad de información
Válido únicamente para las condiciones experimentales bajo las que se modeló	Modela únicamente cuestiones hidrodinámicas
Su gran cantidad de parámetros limita su aplicación	Poco aplicable y poco rentable debido al gran poder de cómputo que requiere
Diseñado para lodos activados bajo condiciones típicas de operación	



# Justificación, objetivos y metodología

<b>3</b>	<b>Justificación</b> .....	<b>45</b>
<b>4</b>	<b>Hipótesis</b> .....	<b>47</b>
<b>5</b>	<b>Objetivos</b> .....	<b>48</b>
5.1	Objetivo general	
5.2	Objetivos particulares	
<b>6</b>	<b>Metodología</b> .....	<b>49</b>
6.1	Descripción del sistema	
6.2	Definiciones	
6.3	Mecanismos de transporte en el MBR	
6.4	Suposiciones iniciales	
6.5	Metodología de escalamiento en el tanque aerobio	
6.6	Metodología de escalamiento en el casete de ultrafiltración	
6.7	Simulación numérica y análisis paramétrico	

### 3. Justificación

Las aguas residuales de la industria de fabricación de alimento para mascota tienen concentraciones muy altas de G&A (de hasta 114 g/L) y de DQO (de hasta 101 g/L), que constituyen una fuente considerable de contaminación y presentan desafíos para los sistemas de tratamiento biológico (Jeganathan y *col.*, 2006). Actualmente, la tendencia es utilizar biorreactores con menor huella ecológica que los sistemas de tratamiento clásicos, y que sean capaces de cumplir con las cada vez más estrictas normas ambientales para los efluentes (Judd, 2010). Los biorreactores de membrana han surgido como una alternativa llamativa para el tratamiento de aguas residuales; sin embargo, es necesario continuar su estudio para mejorar los procesos de tratamiento. Para esto, se han desarrollado modelos matemáticos con el objetivo de simular el transporte y reacción en las fases y regiones involucradas en estos biorreactores. Existen dos principales aproximaciones para el modelado de biorreactores de membrana. Por un lado se encuentran los modelos de lodos activados, los cuales aplican a escala de biorreactor y cuyas ecuaciones han sido postuladas. Dichos modelos deben ser extendidos para aplicarse a MBR por no haber sido diseñados para este tipo de sistemas. Esto conlleva la incorporación de gran cantidad de parámetros que deben ser ajustados. Por otro lado, las simulaciones por CFD modelan el transporte a nivel de escala del continuo, requiriendo análisis computacionales demandantes y generando mayor información de la requerida para aplicaciones industriales. Estas dos opciones motivan el desarrollo de nuevos modelos

con un enfoque diferente. Se requieren modelos diseñados específicamente para biorreactores de membrana. Además, se busca que a partir de ecuaciones fundamentales, pero a través de un filtrado de la información desde el nivel de escala del continuo, se deduzcan modelos para aplicaciones a nivel de escala del biorreactor. Lo anterior sin representar una demanda computacional excesiva para su solución. La información que aportan estos modelos es útil para identificar los parámetros determinantes del flujo de fluidos y el transporte de masa para así proponer mejoras en el diseño y operación de plantas de tratamiento.

## 4. Hipótesis

Es posible deducir modelos matemáticos para un biorreactor de membrana mediante el escalamiento de las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento y con su solución identificar los parámetros determinantes y condiciones de diseño operación favorables para el sistema.

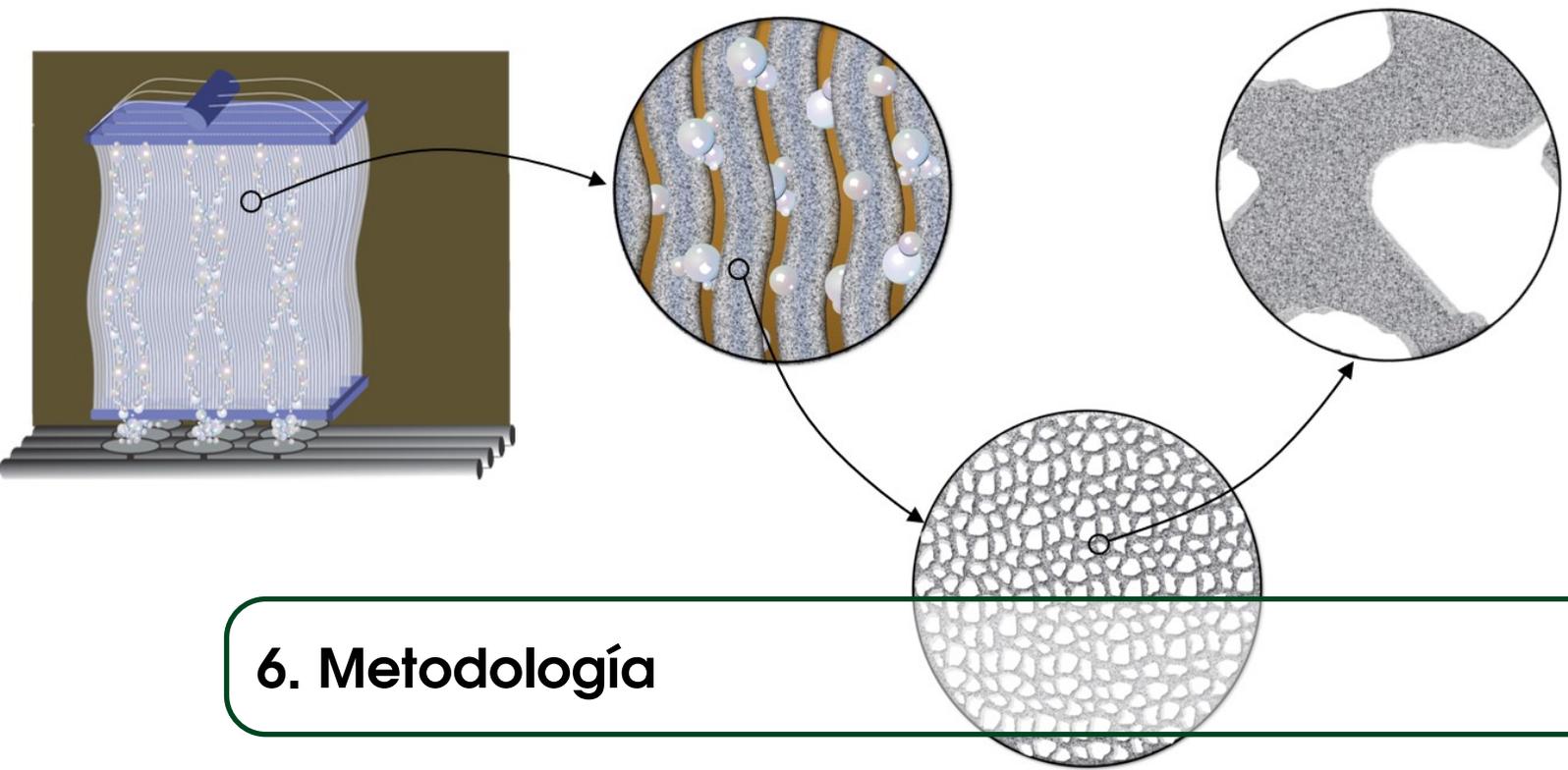
## 5. Objetivos

### 5.1 Objetivo general

Encontrar condiciones de diseño y operación favorables para el transporte de masa de ácidos grasos de cadena larga y de oxígeno en un biorreactor de membrana, a través del desarrollo, solución y análisis de modelos matemáticos de medio efectivo.

### 5.2 Objetivos particulares

1. Desarrollar un modelo matemático para el transporte de masa de ácidos grasos de cadena larga y de oxígeno a nivel de reactor para el tanque aerobio.
2. Deducir las ecuaciones de medio efectivo para el transporte de masa y cantidad de movimiento en los casetes del tanque de membrana.
3. Resolver numéricamente los modelos deducidos, bajo diversas condiciones de diseño y operación.
4. Identificar las condiciones de diseño y operación más favorables para llevar a cabo el proceso.



## 6. Metodología

### 6.1 Descripción del sistema

El sistema a modelar es un biorreactor de membrana en configuración sumergida. Se considera que la alimentación del MBR es el efluente de un sistema de pretratamiento donde parte de las G&A del agua residual cruda ya fueron removidas. Se estiman concentraciones promedio de G&A a la entrada del MBR en  $1.46\text{g L}^{-1}$  (Liu y *col.*, 2003; Kurian y *col.*, 2005; Nakhla y *col.*, 2006; Acharya y *col.*, 2006a,b). En la Figura 6.1 se muestra un esquema del MBR, el cual se divide en 3 tanques. El primer tanque es el de recepción del agua residual a tratar. Este tanque puede encontrarse tanto en condiciones aerobias, como anóxicas o anaerobias, dependiendo del tiempo que el agua residual sea almacenada. Esto se debe a que las aguas residuales ya contienen microorganismos que, durante su estancia en este tanque, llevan a cabo la degradación y consumo de los diferentes sustratos que ahí se encuentran, incluido el oxígeno. A pesar de lo anterior, este tanque no se considerará durante el proceso de modelado matemático, ya que las tasas de consumo se suponen despreciables con respecto al segundo tanque del sistema. El segundo tanque del MBR es el tanque aerobio, donde se localizan los flóculos que contienen células que degradan a las especies químicas. A este tanque se alimenta constantemente una corriente de agua a tratar desde el tanque de recepción (a través de un sistema de bombeo), y se suministra aire desde la parte inferior (a través de un difusor). El efluente del tanque aerobio sirve, a su vez, de alimentación para el tanque de membrana. En este

tercer tanque se lleva a cabo el proceso de separación física (filtrado) y de éste sale una corriente de agua tratada (permeado). Este proceso se lleva a cabo por medio de casetes de ultrafiltración como el mostrado en la Figura 6.1, la estructura de éstos se detalla más adelante.

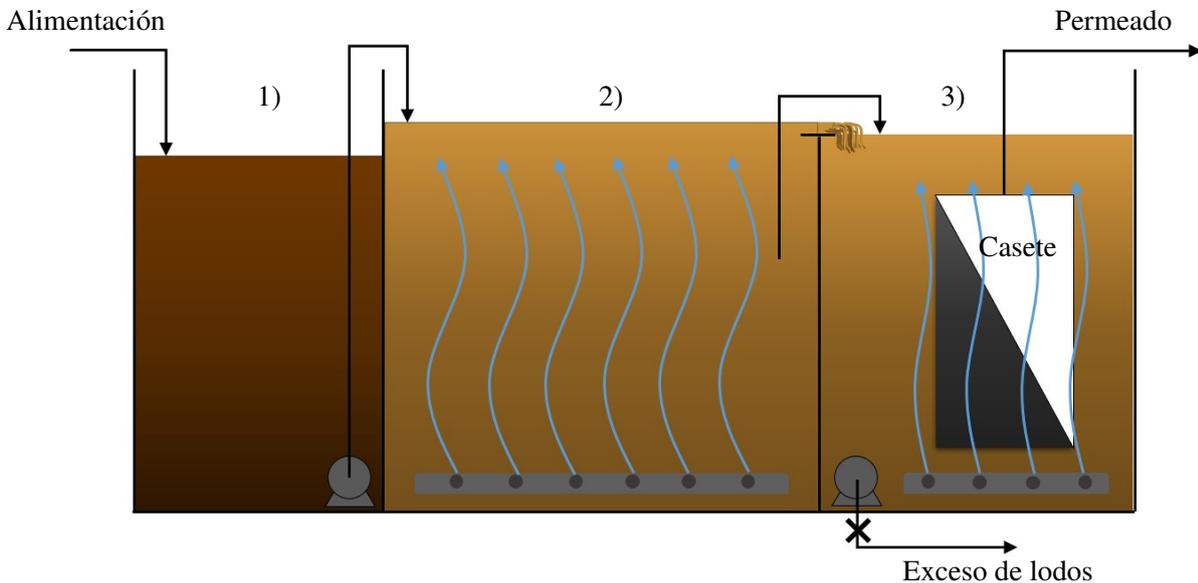


Figura 6.1. Esquema de un biorreactor de membrana (MBR). Tanque de recepción 1), tanque aerobio 2), tanque de membrana 3).

## 6.2 Definiciones

Para el desarrollo de los modelos matemáticos de este trabajo, es conveniente establecer un lenguaje común y sin ambigüedades. Por ello, se establecen las siguientes definiciones:

- **Definición 6.2.1 — Especie química.** Molécula objeto de estudio.
- **Definición 6.2.2 — Fase.** Cantidad de materia con propiedades químicas y físicas uniformes (homogénea) que se puede separar mecánicamente de una mezcla no homogénea y que puede consistir en una sola especie química o una mezcla de especies.
- **Definición 6.2.3 — Región.** Conjunto de dos o más fases.
- **Definición 6.2.4 — Nivel de escala del continuo.** En este nivel de escala, las propiedades físicas son funciones continuas del espacio y del tiempo, esto indica que corresponden a un tipo de promediado de la información a escala inferior. En el estudio de sistemas jerárquicos, es posible identificar un número finito de niveles de escala que permiten definir diversos continuos (Valdés Parada, 2014).

**Definición 6.2.5 — Promediado.** Llevar a cabo un suavizado espacial, es decir, la aplicación de un operador de integración.

**Definición 6.2.6 — Escalamiento.** Reducción sistemática del número de grados de libertad involucrados en el modelo de transporte de la escala microscópica, que permite llegar a un modelo macroscópico. Se lleva a cabo a través de un conjunto de suposiciones y restricciones de escala (Wood, 2009).

Para el análisis del sistema es conveniente identificar las siguientes especies, fases y regiones:

### 1. Especies

- Ácidos grasos de cadena larga (especie *A*): Compuestos orgánicos producto de la hidrólisis de grasas de origen animal (triacilglicéridos) que fungen como fuente de carbono y energía para las células microbianas.
- Oxígeno (especie *B*): Último aceptor de electrones durante la respiración celular aerobia, suministrado por medio de la aireación del tanque.

### 2. Fases

- Fase- $\gamma$ : Fase gas (burbujas de aire), la cual contiene 21 % de oxígeno. No se considera una distribución de tamaños de burbuja debido a que el tipo de difusor a utilizar genera burbujas con tamaños del mismo orden de magnitud.
- Fase- $\lambda$ : Fase oleosa compuesta por gotas que contienen únicamente G&A en forma de triacilglicéridos.
- Fase- $\beta$ : Fase líquida (permeado), compuesta por el líquido localizado al interior de las fibras huecas de la membrana de ultrafiltración.
- Fase- $\kappa$ : Fase sólida que compone al medio poroso de la membrana.

### 3. Regiones

- Región- $\eta$ : Contiene a la fase líquida, especie *A* en forma libre/solubilizada, sólidos inertes y materia orgánica.
- Región- $P_A$ : Células que consumen a la especie *A*, contenidas dentro de los flóculos.
- Región- $N_A$ : Células que no consumen a la especie *A*, contenidas dentro de los flóculos.
- Región- $P_B$ : Células que consumen a la especie *B*, contenidas dentro de los flóculos.
- Región- $N_B$ : Células que no consumen a la especie *B*, contenidas dentro de los

flóculos.

- Región- $\omega$ : Flóculos de diferentes tamaños que contienen una fase líquida, células y matriz extracelular. En esta región se consumen los AGCL. Las ecuaciones que describen el transporte en la región- $\omega$  son específicas para cada tipo de flóculo, por ello se utiliza el subíndice  $j$ , el cual va desde 1 hasta el número de tamaños de flóculos ( $N_f$ ) que estén presentes en el sistema.
- Región- $\sigma$ : Región porosa de las fibras de la membrana de ultrafiltración, comprende una fase líquida (fase- $\beta$ ) y una fase sólida (fase- $\kappa$ ) que compone a la matriz de las fibras huecas.
- Región- $\zeta$ : Casete de ultrafiltración, que contiene a las regiones  $\eta$  y  $\sigma$ , y a las fases  $\beta$  y  $\gamma$ .

## 6.3 Mecanismos de transporte en el MBR

### 6.3.1 Tanque aerobio

En la Figura 6.2 se muestra un esquema de los componentes del tanque aerobio. La corriente de alimentación contiene a la región- $\eta$  y a la fase- $\lambda$  en forma de micelas que se degradan a AGCL para poder ser utilizadas por los microorganismos. Mientras que el difusor de aire provee de oxígeno a través de burbujas con diámetro del orden de  $10^{-3}$ m, para favorecer la transferencia de masa. Además, dentro del tanque se encuentra la región- $\omega$ , en la cual se consumen ambos sustratos (AGCL y oxígeno). Puede observarse que debido al efecto de la aireación, se promueve el mezclado dentro de este tanque, el cual se ilustra mediante líneas de corriente rojas en la Figura 6.2.

La fase- $\lambda$  (fase oleosa) está compuesta únicamente por G&A, las cuales reaccionan en la frontera con la región- $\eta$  (región líquida) para formar a la especie  $A$ , la cual se disuelve en la región- $\eta$ . Conforme se consumen las G&A, las gotas oleosas y micelas que conforman a la fase- $\lambda$  reducen su tamaño hasta hidrolizarse por completo a especie  $A$ . Este fenómeno de reducción de tamaño hasta la eventual desaparición de las gotas oleosas se denomina *degradación*, y se ilustra en la Figura 6.3, en donde se puede apreciar que cada etapa de hidrólisis se traduce en una notable reducción de tamaño de las gotas oleosas. Se supone que la fase- $\lambda$  entra al tanque aerobio por medio de la alimentación, la cual proviene del tanque de recepción. Una vez en el tanque aerobio, las G&A se hidrolizan completamente, por lo tanto, se supone que no hay salida de la fase- $\lambda$  de este tanque.

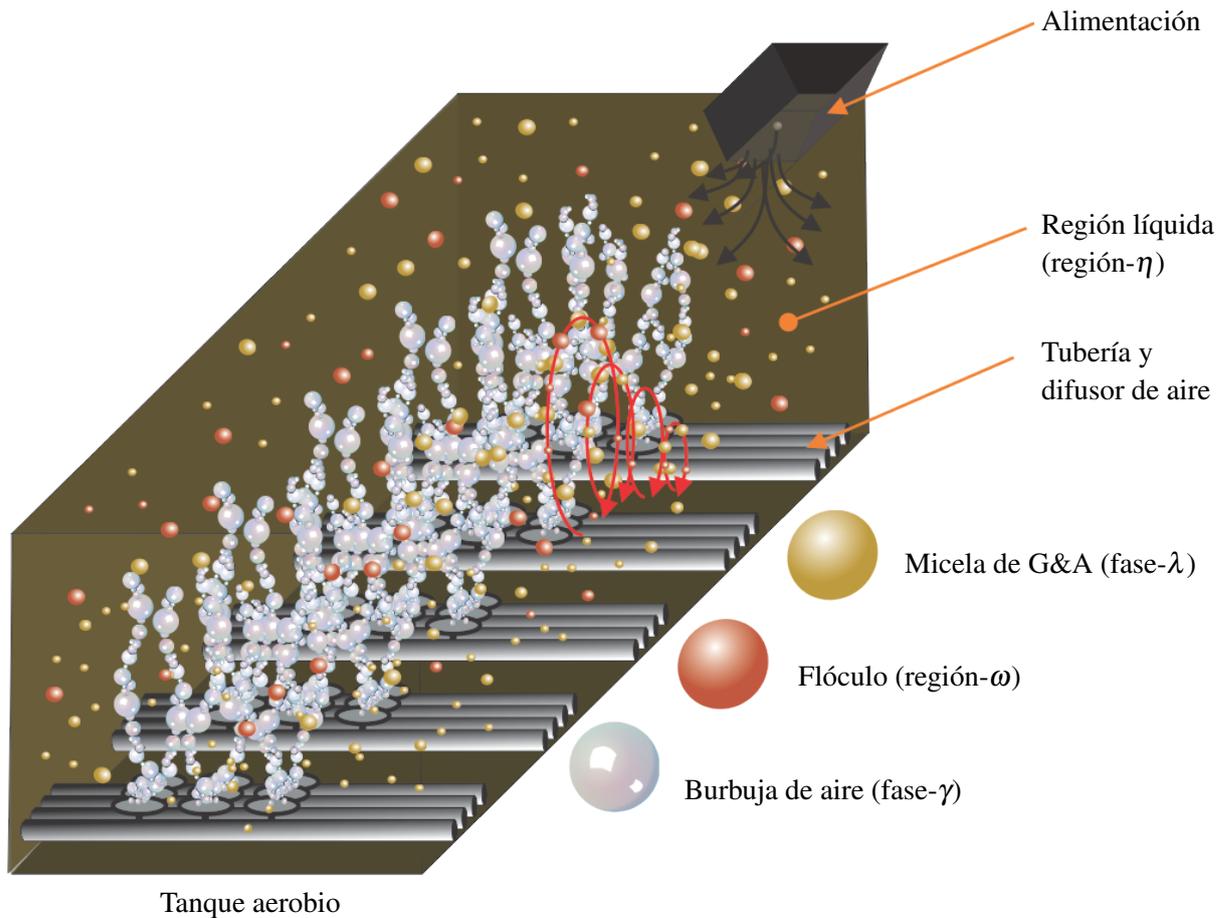


Figura 6.2. Esquema de un tanque aerobio en funcionamiento, identificando las fases y regiones presentes en el sistema.

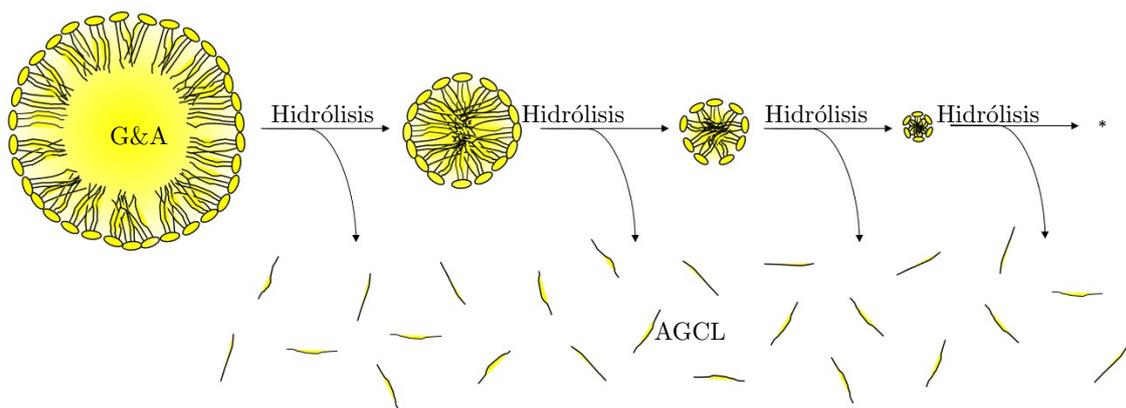


Figura 6.3. Esquema del fenómeno de degradación de las gotas oleosas de la fase- $\lambda$ , mediante procesos de hidrólisis sucesivas.

En la región- $\eta$  ya hay especie A disuelta desde antes de alimentarse al tanque aerobio. Esto se debe a que la hidrólisis de G&A ocurre también en el tanque de almacenamiento, debido a los microorganismos propios del efluente. Por ello, es importante considerar tanto a la especie A,

que ya se encuentra disuelta, como aquella producto del fenómeno de degradación dentro de este tanque. Ambas fuentes de especie  $A$  son transportadas hacia el interior de los flóculos y oxidadas (Figura 6.4). Una vez dentro de la región- $\omega$ , la especie  $A$  es transportada al interior de la región- $P_A$  y consumida como se esquematiza en la Figura 6.5a. No existe transporte hacia el interior de la región- $N_A$ , ya que ésta no participa en el consumo de la especie  $A$ .

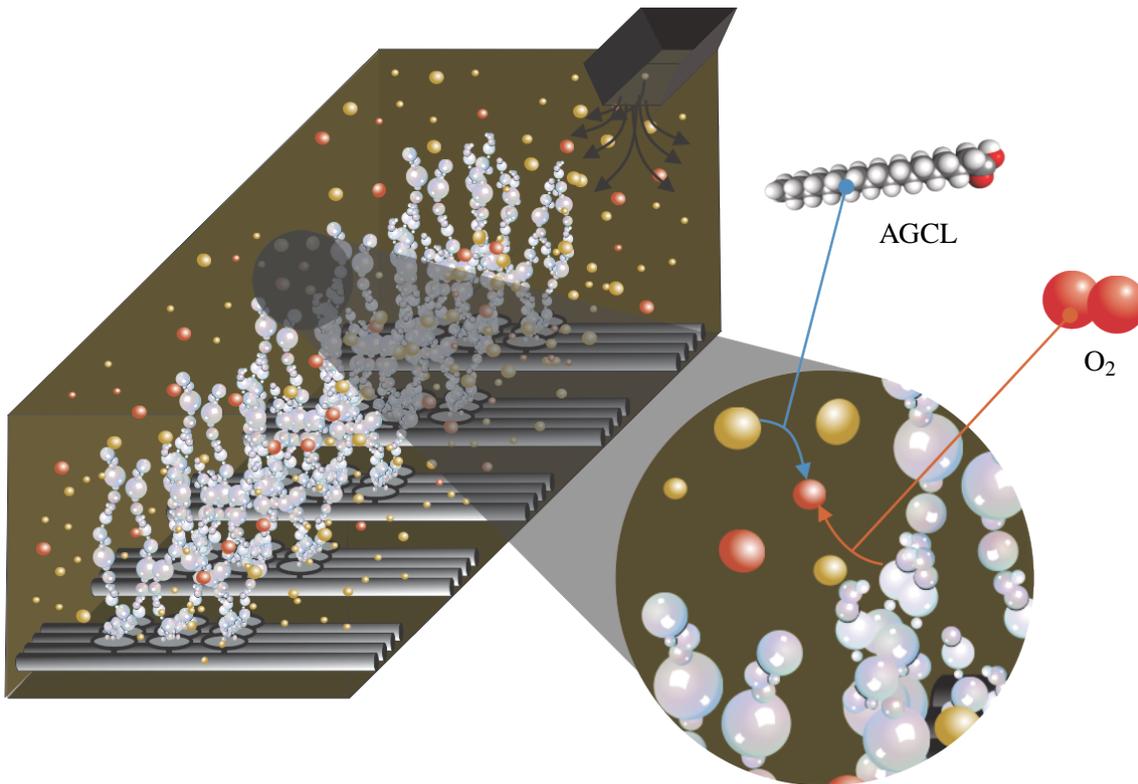


Figura 6.4. Esquema del transporte de las especies  $A$  (AGCL) y  $B$  (oxígeno) en el tanque aerobio. Las esferas en color naranja representan a los flóculos; en amarillo, las micelas de G&A; mientras que las esferas en color lila son burbujas de aire.

Para el caso de la especie  $B$  (Figura 6.5b), ésta debe ser primero transportada desde las burbujas de aire hacia la región- $\eta$ , para posteriormente transportarse al interior de la región- $\omega$ . Una vez dentro de ésta, la especie  $B$  es transportada al interior de la región- $P_B$  y consumida. Al igual que para la especie  $A$ , existe un segundo grupo celular (región- $N_B$ ) donde no se consume el oxígeno. Es importante mencionar que, como primer acercamiento al modelado de esta especie química, se modelará un MBR con un tanque de recepción anaerobio, lo cual implica que no está presente la especie  $B$  en la corriente de alimentación al tanque aerobio.

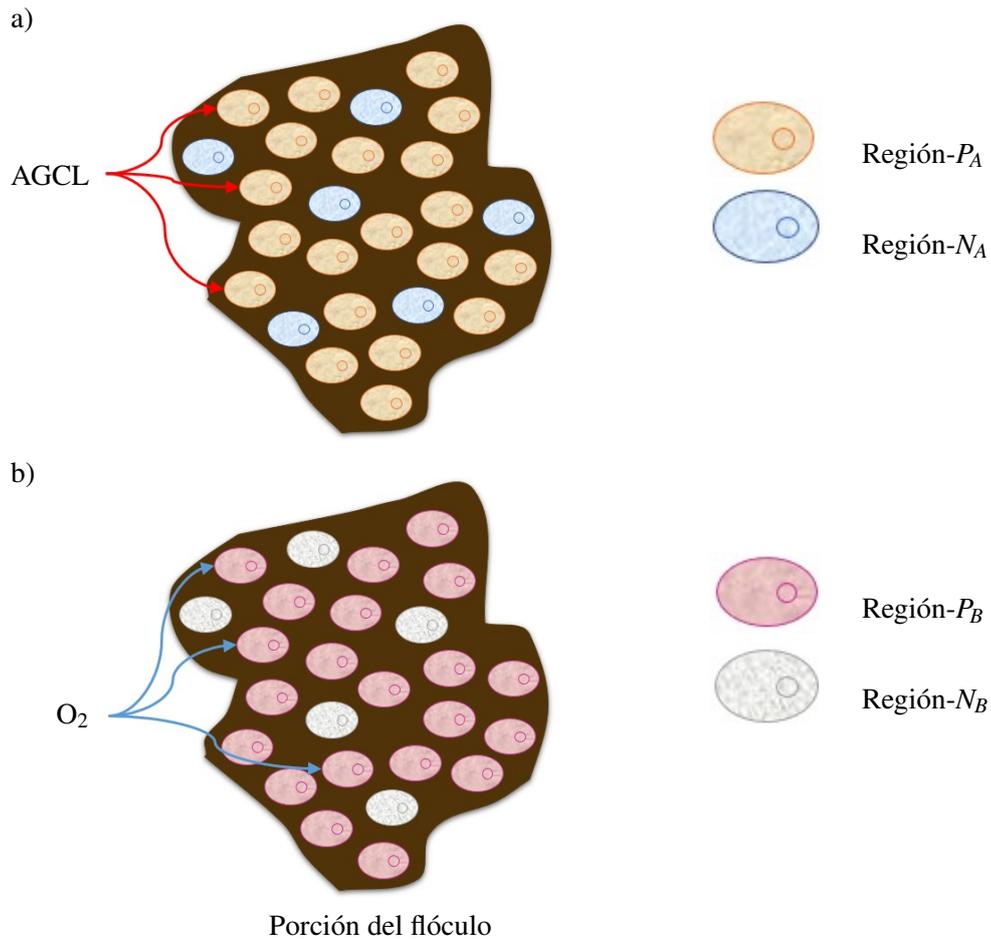


Figura 6.5. Esquema del transporte de las especies A a) y B b) en el interior de la región- $\omega$ . Las células  $P_i$  consumen a la especie  $i$ , mientras que las células  $N_i$ , no lo hacen ( $i = A, B$ ).

### 6.3.2 Tanque de membrana

El tanque de membrana contiene uno o más casetes de ultrafiltración sumergidos en la región- $\eta$  (Figura 6.6). Cada uno de los casetes comprende a un conjunto de módulos, donde las fibras huecas de ultrafiltración se encuentran ordenadas de forma vertical. El proceso de filtración consiste en el paso a través de la membrana de fase líquida, y en el rechazo de materia soluble de acuerdo a su tamaño de corte. La fase que atraviesa la membrana se denomina *permeado*. El permeado proveniente de todas las fibras huecas es colectado en la parte superior de los casetes y retirado, por bombeo, del tanque de membrana.

El aire suministrado al tanque de membrana, a diferencia de aquel en el tanque aerobio, no es utilizado como fuente de oxígeno ya que no hay floculos en este tanque. Las burbujas de aire, al ascender, ayudan a desprender suciedad e incrustaciones de la superficie de la membrana de ultrafiltración. La suciedad de la membrana está dada principalmente por EPS o SMP, mas no

por microorganismos (Teng y col., 2020) en esta configuración. Por estas razones se considera irrelevante el transporte de oxígeno en el tanque de membrana. A diferencia del oxígeno, el transporte de AGCL resulta de importancia, dado que es indeseable el transporte de éstos a través de la membrana por repercutir en la calidad del permeado. Por lo anterior, el desarrollo del modelo en este tanque se centra únicamente en el transporte de masa de la especie A. Cabe agregar que, a diferencia del tanque aerobio, los casetes en el tanque de membrana constituyen un sistema multifásico y multiescala. Esta observación es relevante ya que determina el tipo de tratamiento a seguir para llevar a cabo el proceso de escalamiento de las ecuaciones de transporte, como se explica más adelante.

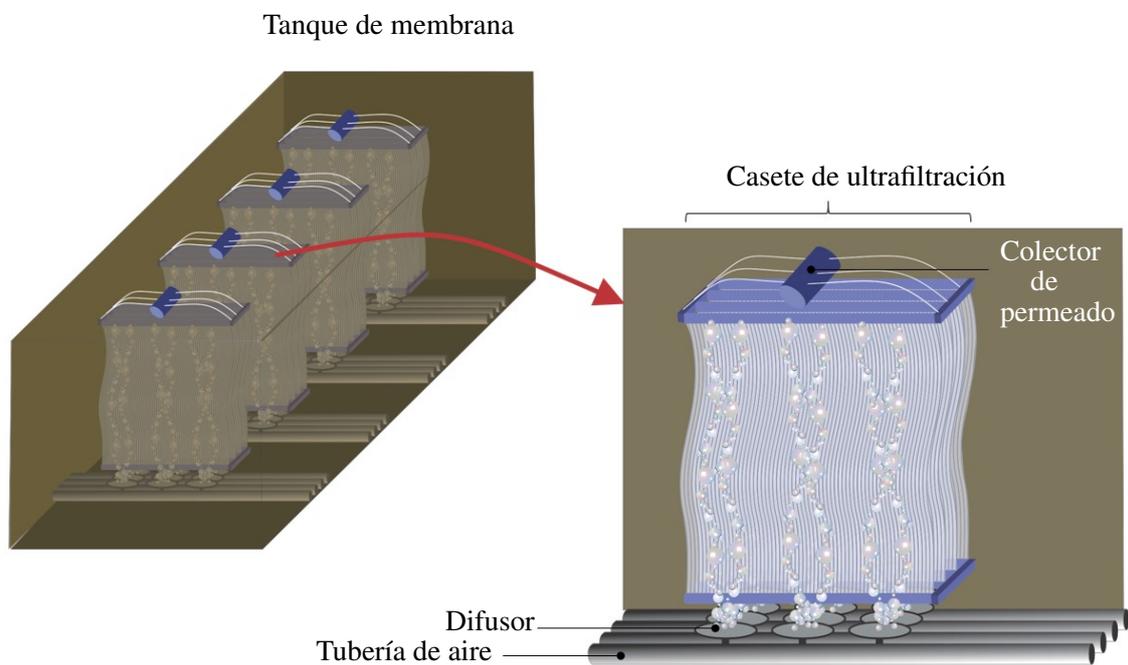


Figura 6.6. Esquema de los componentes del tanque de membrana: casete de ultrafiltración, colector de permeado, difusor y tubería de aire.

En la Figura 6.7 se muestra el arreglo y dimensiones típicas de los componentes de un casete de ultrafiltración del MBR. Las dimensiones corresponden con la de una membrana comercial utilizada a nivel planta de tratamiento (SUEZ, 2020). Como puede observarse, las fibras huecas son las unidades básicas del sistema de filtración, éstas componen módulos, los cuales en su conjunto constituyen a cada casete. Tanto el número de módulos por casete, como el número de casetes por tanque de membrana, dependen de la capacidad instalada de la PTAR.

Es importante recordar que la alimentación del tanque de membrana es el efluente del tanque

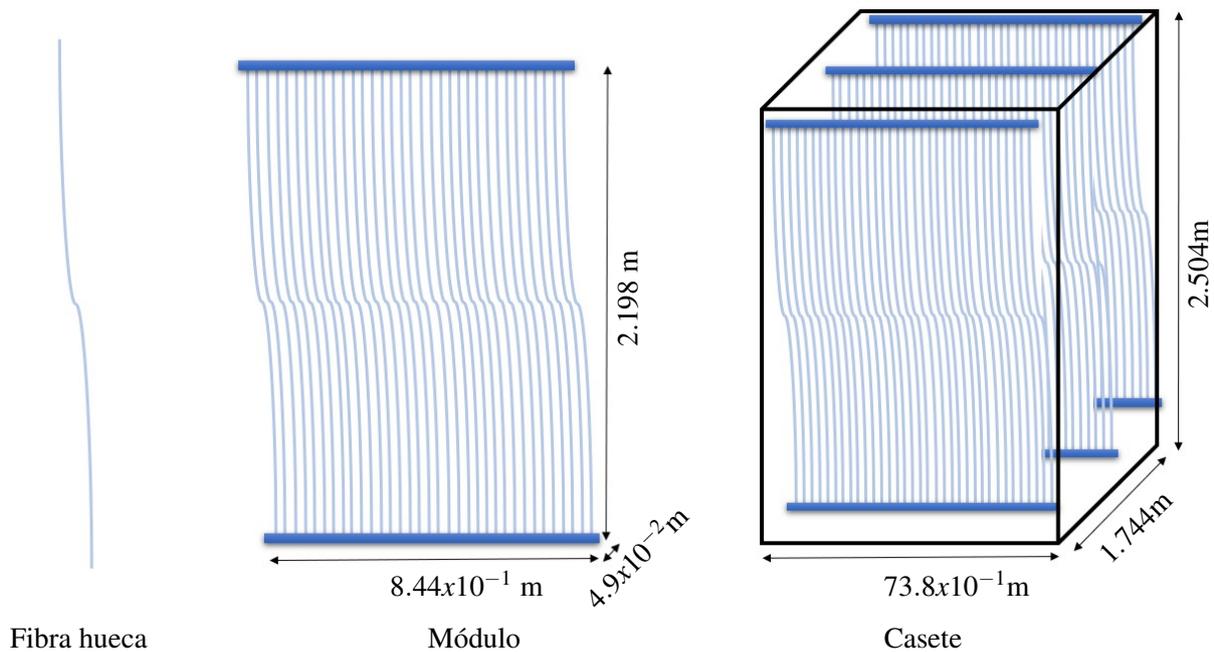


Figura 6.7. Esquema de los componentes del casete de ultrafiltración del biorreactor de membrana, incluyendo longitudes características del módulo y del casete.

aerobio. La especie  $A$  que no haya sido consumida es transportada del primer al segundo tanque. El mecanismo por el cual la especie  $A$  se transporta dentro del tanque de membrana y a través de cada una de las fibras huecas que componen al casete de filtración se observa en la Figura 6.8. Se puede notar que la fibra hueca se compone de una pared porosa que posee un haz hacia donde se transporta la fase- $\beta$ . Esta matriz porosa que compone a las fibras es un sólido inerte (fase- $\kappa$ ) con tamaño de poro de  $0.04 \mu\text{m}$ , rechazando así a los sólidos, materia orgánica y microorganismos de tamaño mayor. El diámetro interno de cada fibra tiene  $0.8 \text{ mm}$  de longitud, mientras que el diámetro externo mide  $1.9 \text{ mm}$  (SUEZ, 2020). El espesor de la matriz es entonces de  $0.55 \text{ mm}$ , distancia que será recorrida por la especie química disuelta en la fase- $\beta$  que no sean rechazada por la membrana.

Cada casete de ultrafiltración posee una jerarquía estructural, como se observa en la Figura 6.9. Ésta ilustra desde el casete como escala más grande para el proceso de filtración, nivel I; hasta la escala de poro de la matriz que compone a las fibras huecas, nivel IV. En el nivel II se pueden observar a las fases y regiones que componen al casete de ultrafiltración. Mientras que en el nivel III se aprecia la estructura de las fibras huecas, conformada por una matriz sólida y una fase líquida que rellena los poros.

Para llevar a cabo el desarrollo del modelo macroscópico del tanque de membrana, es necesario

primero obtener un modelo de medio efectivo que sea capaz de describir el transporte de masa en forma promedio en cada punto del casete de ultrafiltración. Por lo tanto, se requiere de un proceso de escalamiento desde la escala más pequeña (nivel IV) hasta el casete completo (nivel I). Esta nomenclatura se conserva en los desarrollos matemáticos posteriores.

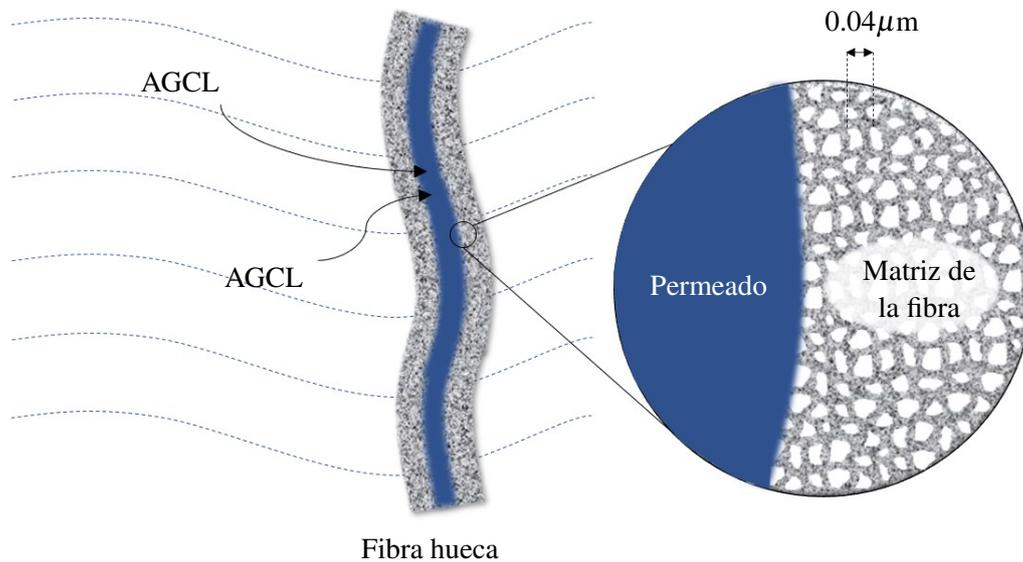


Figura 6.8. Corte longitudinal de una fibra hueca, identificando el sentido del transporte de la especie A. Además, se muestra un acercamiento de la frontera entre el permeado y la matriz porosa, incluyendo el diámetro de poro característico.

## 6.4 Suposiciones iniciales

Para el desarrollo de los modelos matemáticos para los tanques, se imponen dos tipos de suposiciones. Un primer conjunto corresponde a las suposiciones involucradas en el planteamiento de los problemas de transporte al nivel de escala del continuo (*suposiciones iniciales*). El segundo tipo de suposiciones corresponde a *postulados de escalamiento* y son necesarios para llevar a cabo el filtrado sistemático de información para pasar de un cierto nivel de escala a otro superior. A continuación se listan exclusivamente las suposiciones iniciales, mientras que los postulados de escalamiento se identifican con claridad más adelante en los desarrollos de los modelos macroscópicos (capítulos 7 y 8).

### 6.4.1 Para el modelo del tanque aerobio

Se cuenta con dos conjuntos de suposiciones, las primeras se relacionan con el modelo de los flóculos y se listan como sigue:

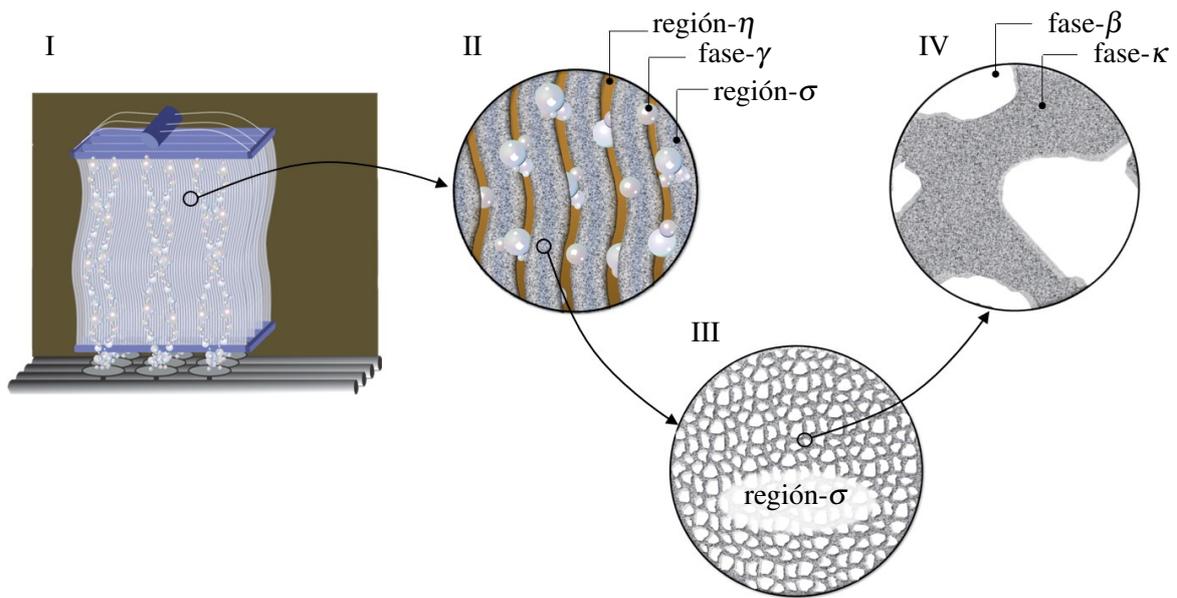


Figura 6.9. Esquema de la estructura de un casete de ultrafiltración como un sistema jerárquico. El nivel I corresponde al casete de ultrafiltración, en el nivel II se distinguen a la fase- $\gamma$  y a las regiones  $\sigma$  y  $\eta$ . El nivel III corresponde al seno del medio poroso (región- $\sigma$ ), que compone a las fibras huecas. Por último, en el nivel de escala IV se aprecia a la fase fluida (fase- $\beta$ ) y a la fase sólida (fase- $\kappa$ ), que conforman al medio poroso.

1. La concentración de las especies  $A$  y  $B$  está suficientemente diluida como para poder aplicar la Ley de Fick.
2. Las especies  $A$  y  $B$  se transportan únicamente a través de las células vivas que las consumen (células  $P_A$  y  $P_B$ , respectivamente; ver Figura 6.5). Además, las reacciones metabólicas tienen lugar sólo dentro de las células.
3. El consumo de ambos sustratos se describe mediante la cinética de Michaelis-Menten (Hsu y *col.*, 1983; Becker y *col.*, 1997; Nakhla y *col.*, 2006), modelo que no considera la inhibición por sustrato.
4. La velocidad de transporte puede suponerse mucho mayor que la velocidad de crecimiento celular.
5. Fenómenos en la frontera, como la acumulación de masa de las especies, la deformación debida al crecimiento celular y las reacciones bioquímicas, son despreciables respecto al transporte perpendicular a los flóculos.
6. Existe una disparidad de longitudes características entre el menor diámetro de fóculo y la longitud característica a escala celular. Esta última se define como la máxima longitud

intra o inter-celular. Bajo estas condiciones es posible definir un dominio de promediado y usar ecuaciones de medio efectivo para describir el transporte de masa en los flóculos.

7. Equilibrio local másico a nivel de flóculo. Por lo tanto, la concentración promedio en la matriz extracelular se supone igual a la concentración promedio dentro de las células.

A continuación, se listan las suposiciones para la zona externa a los flóculos, dentro del tanque aerobio:

1. La formación de biopelícula en las paredes del tanque es despreciable con respecto a la cantidad de biomasa presente en los flóculos.
2. La concentración de microorganismos no floculados es despreciable con respecto a la concentración de microorganismos en los flóculos.
3. Los sólidos inertes no se transportan entre fases ni reaccionan.
4. El pH y la temperatura son constantes.
5. La concentración de G&A que se maneja en el sistema permite la constante hidrólisis a AGCL, sin derivar en la inhibición por altas concentraciones.
6. Existen resistencias a la transferencia de masa entre la fase- $\gamma$  y la región- $\eta$ . Lo mismo ocurre en la frontera entre la fase- $\lambda$  y la región- $\eta$ .
7. La hidrólisis es una reacción de primer orden que tiene lugar en la frontera entre la fase- $\lambda$  y la región- $\eta$ .
8. No hay transporte de masa directamente entre las fases  $\gamma$  o  $\lambda$  y los flóculos.
9. Estado cuasi-estacionario para el transporte de cantidad de movimiento.

#### 6.4.2 Para el modelo del tanque de membrana

1. Flujo incompresible y newtoniano.
2. Estado cuasi-estacionario para el transporte de cantidad de movimiento. Esto quiere decir que la velocidad y la presión de los fluidos alcanzan el estado estacionario antes que la concentración de la especie  $A$  en todas las fases y regiones del sistema.
3. La concentración de la especie  $A$  está suficientemente diluida como para poder aplicar la ley de Fick.
4. La matriz de las fibras huecas es inerte.
5. Las burbujas de aire tienen geometría esférica (Amaral y col., 2018).
6. La concentración de microorganismos en este tanque es despreciable con respecto a la

- concentración en el tanque aerobio. Por lo tanto, no se considera la oxidación de G&A.
7. La concentración de G&A, y su respectiva hidrólisis, en el tanque de membrana son despreciables con respecto a la concentración y tasa de hidrólisis en el tanque aerobio.
  8. Los sólidos son inertes mecánicamente, no se transportan ni reaccionan y son rechazados por la membrana.
  9. El pH y la temperatura son controlados durante la operación, permaneciendo constantes.
  10. No hay transporte de masa directamente entre la fase gas y la región- $\zeta$ .
  11. Existen resistencias a la transferencia de masa entre la región fluida (o bien entre la fase fluida en la corriente de permeado) y el medio poroso que compone a las fibras huecas.

## 6.5 Metodología de escalamiento en el tanque aerobio

Para llevar a cabo el promediado de las ecuaciones a escala macroscópica para el tanque aerobio, se recurre al método del promedio volumétrico (Whitaker, 1999). Sin embargo, debido a que en este sistema se desea obtener ecuaciones que no dependan del espacio, se promedia en todo el volumen del reactor. Para ello se requiere de un proceso de suavizado espacial tanto de las ecuaciones que describen el transporte de masa por especie como las ecuaciones de transporte total de masa en las fases y regiones. Esto se ve reflejado en los siguientes pasos para llevar a cabo el promediado y escalamiento:

1. Se define la región arbitraria que representa al dominio ocupado por la fase o región en el tanque.
2. Se definen los operadores de promediado para las fases y regiones cuyas ecuaciones se vayan a escalar.
3. Se aplican los operadores de integración, así como los teoremas general del transporte (Bird y col., 2002) y de la divergencia para intercambiar las operaciones de diferenciación (espacial y temporal) e integración (espacial).

**Teorema 6.5.1 — Teorema general del transporte.** Sea  $f$  una función suave y definida en el espacio y en el tiempo, la derivada total de su integral en una región arbitraria,  $\mathcal{V}_A$ , cumple con la siguiente igualdad

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_A} f(\mathbf{r}, t) dV = \int_{\mathcal{V}_A} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot (f\mathbf{w}) dA \quad (6.1)$$

en donde  $\mathbf{r}$  es un vector de posición,  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a la superficie de la región de integración,  $\mathcal{A}_A$  es la superficie de la región arbitraria y  $\mathbf{w}$  es la velocidad de desplazamiento de dicha superficie.

**Teorema 6.5.2 — Teorema de la divergencia.** Sea  $\mathbf{a}$  una función vectorial continua en el espacio, la integral volumétrica de su divergencia satisface la siguiente igualdad:

$$\int_{\mathcal{V}_A} \nabla \cdot \mathbf{a} \, dV = \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \, dA \quad (6.2)$$

4. Se descomponen las superficies de cada dominio de promediado, para posteriormente sustituir las condiciones de frontera correspondientes.
5. Se simplifican las ecuaciones promedio mediante suposiciones razonables (definidas a lo largo del desarrollo), las cuales constituyen postulados de escalamiento y tienen fundamento en las condiciones de operación típicas del sistema.

## 6.6 Metodología de escalamiento en el casete de ultrafiltración

El promediado de las ecuaciones que describen el transporte de masa a escala microscópica se lleva a cabo mediante el método de promedio volumétrico propuesto por Whitaker (1999). Este promediado se desarrolla únicamente para la especie  $A$  y se utiliza para obtener las ecuaciones de medio efectivo en los casetes de filtración del tanque de membrana, además se aplican a las ecuaciones de conservación de masa total y de cantidad de movimiento en este mismo dominio. El procedimiento se resume en los siguientes pasos:

1. Se define una región de promediado,  $\mathcal{V}$ , que incluye porciones de las fases (y/o regiones) de interés. Se identifican las longitudes de escala características del sistema. Debido a que el objetivo es desarrollar ecuaciones para un nuevo continuo (*i.e.*, ecuaciones de medio efectivo), la longitud característica de la región de promediado ( $r_0$ ) debe ser mucho menor que la menor longitud característica del sistema macroscópico ( $L$ ) y al mismo tiempo mucho mayor que la máxima longitud característica a escala microscópica ( $\ell$ ). Esto es:  $\ell \ll r_0 \ll L$ .
2. Se definen los operadores de promediado superficial e intrínseco para la concentración de la especie  $A$  en cada fase (o región) dentro de la región de promediado. Estos operadores

de promediado se definen como:

**Definición 6.6.1 — Promedio superficial.** Sea  $\psi$  una función suave por tramos definida en la fase (o región)- $Y$ , el operador de promedio superficial se define como:

$$\langle \psi \rangle_Y = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_Y} \psi dV \quad (6.3)$$

**Definición 6.6.2 — Promedio intrínseco.** Sea  $\psi$  una función suave por tramos definida en la fase (o región)- $Y$ , el operador de promedio intrínseco se define como:

$$\langle \psi \rangle^Y = \frac{1}{V_Y} \int_{\mathcal{V}_Y} \psi dV \quad (6.4)$$

Ambos operadores integrales están acoplados mediante la relación de Dupuit-Forchheimer (Nield y Bejan, 2012):

$$\langle \psi \rangle_Y = \frac{V_Y}{V} \langle \psi \rangle^Y \quad (6.5)$$

3. Se aplica el operador de promediado a las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa en la microescala. En este paso se hace uso del teorema general del transporte (ecuación (6.1)) y del teorema de promediado espacial (Howes y Whitaker, 1985), esto con el objetivo de intercambiar las operaciones de diferenciación (temporal y espacial) e integración (espacial).

**Teorema 6.6.1 — Teorema de promediado espacial.** Sea  $\mathbf{a}$  una función vectorial continua en el espacio, el promedio superficial de su divergencia satisface la siguiente identidad:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{a} \rangle_Y = \nabla \cdot \langle \mathbf{a} \rangle_Y + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} dA \quad (6.6)$$

4. Una vez aplicados los teoremas, se sustituyen las condiciones de frontera correspondientes. Para eliminar la presencia de la concentración microscópica de la ecuación resultante, se recurre a la descomposición espacial de Gray (1975). Ésta consiste en descomponer linealmente a las cantidades microscópicas en su promedio intrínseco y desviaciones de

acuerdo con la ecuación:

$$c_A = \langle c_A \rangle^Y + \tilde{c}_A \quad (6.7)$$

Al modelo resultante se le denomina *modelo promedio no cerrado*. En este modelo, las integrales que contienen ahora a las variables de desviación pueden entenderse físicamente como *filtros de información* de la microescala.

Como consecuencia de la separación de longitudes características que debe satisfacer la región de promediado, se deduce que los campos de las desviaciones espaciales están acotados de acuerdo a la siguiente ecuación promedio:

$$\langle \tilde{c}_A \rangle^Y = 0 \quad (6.8)$$

5. Con el fin de conocer las variables de las desviaciones, es necesario plantear y resolver las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera que las gobiernan. Para deducir la ecuación diferencial, se resta el modelo no cerrado a la ecuación gobernante de la microescala. Mientras que las condiciones de frontera correspondientes, resultan del uso de la descomposición espacial de Gray (ecuación (6.7)) en sus contrapartes microscópicas. Tanto la ecuación diferencial como las condiciones de frontera pueden ser simplificadas a través de restricciones de escala y tiempo mediante análisis de orden de magnitud.
6. Dado que solo se desea resolver el problema de las desviaciones en una región representativa de la microescala, ésta puede ser visualizada como una celda unitaria con características periódicas. En estas celdas es razonable suponer que las desviaciones espaciales de la concentración son funciones periódicas<sup>a</sup>. La suposición de periodicidad delimita el rango de aplicación del modelo deducido a zonas que no se vean afectadas por las condiciones de frontera macroscópicas del sistema.
7. Se proponen las soluciones formales en términos de las fuentes del problema de las desviaciones y a las funciones encargadas de mapear la influencia de cada fuente sobre los campos de las desviaciones se denominan *variables de cerradura*. Las variables de cerradura satisfacen un problema de valor a la frontera en la celda periódica, el cual se conoce como *problema de cerradura*. En general se producen tantos problemas de

cerradura como fuentes haya en el problema de las desviaciones.

8. Se sustituye la solución formal del problema de las desviaciones en los filtros del modelo no cerrado para obtener el modelo promedio cerrado o de medio efectivo. La ecuación resultante tendrá dependencia espacial y temporal de la concentración promedio.
9. Finalmente, se simplifica, de ser pertinente, el modelo promedio cerrado y se definen los coeficientes de medio efectivo asociados. Los valores de dichos coeficientes se pueden predecir a partir de la solución de los problemas de cerradura. Como primera aproximación, en este trabajo se predecirán estos coeficientes a través de ecuaciones reportadas en la literatura, y que se detallan más adelante.

<sup>a</sup>La misma suposición no puede aplicarse a la concentración puntual.

## 6.7 Simulación numérica y análisis paramétrico

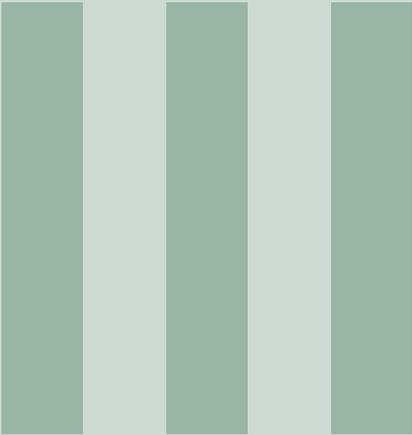
Se recurre al software Comsol Multiphysics 5.5 para resolver numéricamente las ecuaciones al nivel de escala de cada tanque. Comsol Multiphysics permite resolver el modelo planteado por el método del elemento finito. Este es un método numérico que permite la aproximación de soluciones de ecuaciones diferenciales parciales en dominios discretos. La solución numérica consiste en dividir al continuo en un número finito de elementos con nodos como puntos de unión de cada elemento con sus adyacentes, donde se resuelve una interpolación con parámetros desconocidos para cada elemento (Jin, 2014), los cuales se deben determinar en una sucesión de iteraciones.

Para realizar las simulaciones numéricas del tanque aerobio, se dividió el análisis en cada una de las dos especies (*A* y *B*). Esto tiene lugar una vez que se ha llevado a cabo el promediado de las ecuaciones de transporte de masa a escala microscópica. El primer paso consiste en convertir a coordenadas esféricas a las ecuaciones que describen el transporte en la región- $\omega$ , ya que es conveniente visualizar a los flóculos como dominios esféricos para la simulación. Para facilitar el análisis, y a partir de ecuaciones promedio para cada fase y región, se obtienen ecuaciones en términos de números y parámetros adimensionales. Cabe agregar que el modelo a escala del tanque aerobio se compone de ecuaciones dinámicas, de las cuales únicamente las ecuaciones para los flóculos dependen de la posición. Estas ecuaciones se introducen en el software de simulación y los números adimensionales de los que dependen las variables de respuesta se introducen como parámetros. En el Anexo A se presenta la descripción paso a paso de los programas utilizados para la simulación numérica. Posteriormente, se delimita la magnitud de los parámetros incluidos

en el modelo, para lo cual se recurre a la literatura. Una vez que se cuenta con intervalos dentro de los cuales puede localizarse el valor de cada parámetro, es conveniente realizar un análisis de tamaño del efecto. A partir de este análisis es posible conocer el tamaño de la variación generada sobre la variable respuesta, debido a la variación de los parámetros (dentro de su intervalo de validez anteriormente definido). Con estas herramientas se procede a identificar las magnitudes de los parámetros que dan lugar a los mejores resultados en términos de la variable respuesta o que representa adecuadamente algún fenómeno determinado a estudiar. Finalmente, se considera el efecto que tiene, sobre la variable respuesta, el considerar una distribución de tamaños de flocos.

Para el tanque de membrana, el análisis se enfoca únicamente en la especie *A*. Una vez concluido el escalamiento y promediado de las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa, los modelos resultantes se introducen al software Comsol Multiphysics 5.5. El primer análisis se enfoca únicamente en el transporte de cantidad de movimiento y se lleva a cabo de forma estacionaria. En éste se estudia el efecto que los parámetros y números adimensionales tienen sobre la velocidad de los fluidos involucrados. De esta forma, se pueden utilizar estos resultados para el análisis de la transferencia de masa de la especie *A*, el cual se lleva a cabo de manera dinámica tanto en la región líquida que se encuentra dentro del tanque, como en los casetes de ultrafiltración. De forma similar al tanque aerobio, se lleva a cabo la limitación de la magnitud de los parámetros incluidos en el modelo, para lo cual se recurre de nueva cuenta a la literatura. Finalmente, se procede a identificar las magnitudes de los parámetros que producen mejores resultados, de acuerdo con la variable respuesta; con estas condiciones se evalúa el modelo 3D del tanque de membrana y se analizan los resultados obtenidos.

Los procesos de transferencia de masa en ambos tanques están acoplados, por lo que la concentración de la especie *A* a la salida del tanque aerobio y a la entrada del tanque de membrana deben coincidir. Es por esto que el resultado correspondiente a las condiciones de operación más favorables para el primer tanque será el que se utilice como punto de partida en el tanque de membrana.



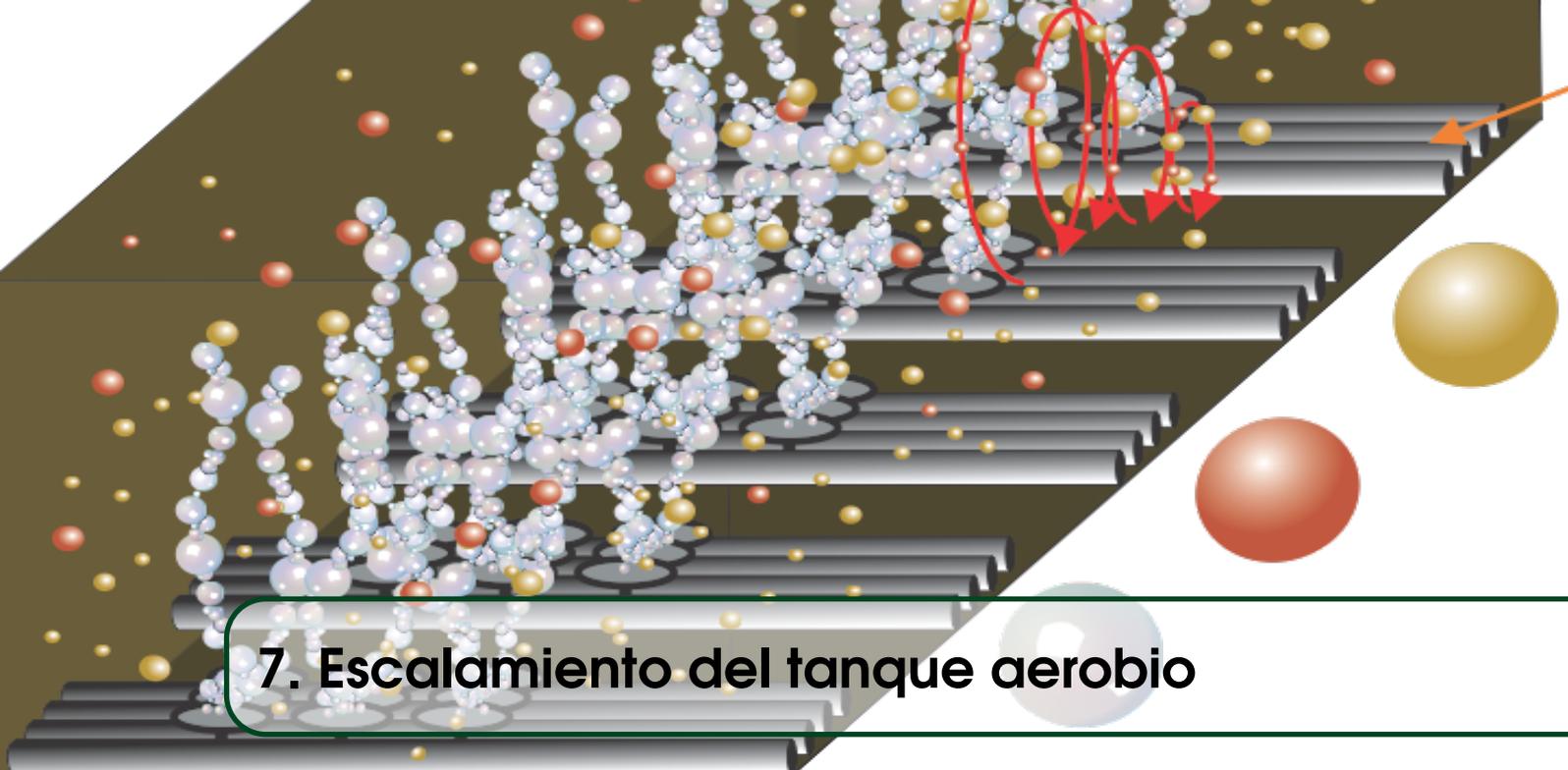
# Resultados: Modelado matemático

## **7 Escalamiento del tanque aerobio . . . . 68**

- 7.1 Promediado de las ecuaciones de transporte de masa total
- 7.2 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie  $A$
- 7.3 Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie  $A$  en la región- $\eta$
- 7.4 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie  $B$
- 7.5 Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie  $B$
- 7.6 Resumen de modelos macroscópicos

## **8 Escalamiento del tanque de membrana 91**

- 8.1 Promediado y escalamiento del flujo de fluidos
- 8.2 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa de la especie  $A$
- 8.3 Resumen de los modelos del tanque de membrana

The diagram shows a cross-section of a biofilm on a stepped surface. The surface is composed of several horizontal layers. A dense layer of particles, including white, blue, red, and yellow spheres, is attached to the surface. Red arrows indicate the movement of particles within the biofilm. To the right, a few larger particles (yellow, red, and white) are shown in the fluid phase. The title '7. Escalamiento del tanque aerobio' is overlaid on the bottom part of the diagram.

## 7. Escalamiento del tanque aerobio

### Preliminares

El objetivo de este capítulo es deducir modelos de transporte de masa (total y por especies) al nivel de escala del tanque aerobio. Para ello, se suavizan en el espacio las ecuaciones gobernantes en cada fase y región del sistema con el fin de eliminar su dependencia espacial y conservar únicamente la dependencia temporal. Lo anterior no se aplica en los flóculos, ya que en éstos se conserva la dependencia espacial. Sin embargo, el modelo de transporte en esta región no se deduce aquí ya que está disponible en la literatura, como se explica más adelante. Para cumplir con el objetivo del capítulo, éste se organiza como sigue: En la sección 7.1 se realiza el promediado de las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa total en las diferentes fases y regiones. En la sección 7.2 se definen las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa de la especie *A*, así como las condiciones de frontera aplicables para cada dominio. Esto permite llevar a cabo el promediado y escalamiento de dichas ecuaciones en la sección 7.3. Una secuencia similar se sigue para el caso de la especie *B*, definiéndose las ecuaciones gobernantes del transporte de masa de la especie en la sección 7.4 y el promediado de estas ecuaciones en la sección 7.5. Finalmente, en la sección 7.6 se retoman todas las ecuaciones requeridas para modelar el transporte de masa de las especies *A* y *B* en el tanque aerobio. Además, se lleva a cabo la transformación de las ecuaciones para los flóculos a coordenadas esféricas y se realiza la adimensionalización de los modelos finales de todas

las fases y regiones. Estos resultados sirven como base para las simulaciones numéricas y análisis paramétrico que se reporta en el capítulo 9.

## 7.1 Promediado de las ecuaciones de transporte de masa total

### 7.1.1 Región- $\eta$

La ecuación de continuidad que rige el transporte de masa en esta región es:

$$\frac{\partial \rho_\eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\eta \mathbf{v}_\eta) = 0 \quad (7.1)$$

donde  $\rho_\eta$  representa a la densidad y  $\mathbf{v}_\eta$  la velocidad, ambas de la región- $\eta$ . El primer término de la ecuación anterior representa la acumulación, mientras que el segundo hace referencia al transporte de masa de  $\eta$ .

Para llevar a cabo el proceso de promediado y escalamiento de esta ecuación, se comienza por definir una región arbitraria  $\mathcal{V}_\eta$  (de volumen  $V_\eta$ ) que representa el dominio ocupado por la región- $\eta$  en el tanque y es, en general, función del tiempo. A continuación, se integra la ecuación (7.1) en  $\mathcal{V}_\eta$ , para obtener la siguiente expresión:

$$\int_{\mathcal{V}_\eta} \frac{\partial \rho_\eta}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_\eta} \nabla \cdot (\rho_\eta \mathbf{v}_\eta) dV = 0 \quad (7.2)$$

Aplicando los teoremas general del transporte (ecuación 6.1) y de la divergencia (ecuación 6.5.2) a la ecuación anterior es posible intercambiar derivadas parciales temporales por derivadas totales en el primer término, y también transformar la integral de volumen del segundo término por una integral de superficie, dando como resultado:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\eta} \rho_\eta dV + \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot \rho_\eta (\mathbf{v}_\eta - \mathbf{w}_\eta) dA = 0 \quad (7.3)$$

donde  $\mathcal{A}_\eta$  se define como la superficie de  $\mathcal{V}_\eta$  y  $\mathbf{w}_\eta$  describe la velocidad de  $\mathcal{A}_\eta$ .

Bajo la suposición de flujo incompresible puede considerarse a la densidad como una constante, por lo que al dividir ambos lados de la ecuación anterior entre  $\rho_\eta$ , se obtiene la siguiente ecuación

integro-diferencial:

$$\frac{dV_\eta}{dt} + \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot (\mathbf{v}_\eta - \mathbf{w}_\eta) dA = 0 \quad (7.4)$$

Para proseguir el análisis, es conveniente expresar que la superficie  $\mathcal{A}_\eta$  puede descomponerse de la siguiente forma:

$$\mathcal{A}_\eta = \mathcal{A}_{entrada} + \mathcal{A}_{salida} + \mathcal{A}_{difusor} + \mathcal{A}_{paredes} + \mathcal{A}_{superior} + \mathcal{A}_{flóculos} + \mathcal{A}_{burbujas} + \mathcal{A}_{gotas\ oleosas} \quad (7.5)$$

En la ecuación anterior se consideraron todas las superficies con las que la región- $\eta$  entra en contacto dentro del tanque aerobio: superficie de entrada al tanque aerobio  $\mathcal{A}_{entrada}$ , superficie de salida del tanque aerobio  $\mathcal{A}_{salida}$ , superficie de contacto con el difusor de aire  $\mathcal{A}_{difusor}$ , las paredes del tanque aerobio  $\mathcal{A}_{paredes}$ , la superficie del líquido en el tanque  $\mathcal{A}_{superior}$ , la superficie en contacto con los flóculos  $\mathcal{A}_{flóculos}$ , la superficie en contacto con las burbujas  $\mathcal{A}_{burbujas}$  y la superficie con las gotas oleosas  $\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$ .

Debido a que cada superficie tiene características diferentes, incluyendo movimiento o inmovilidad de la misma, es importante definir los valores para la velocidad que lleva la región- $\eta$  y la frontera con cada uno de los componentes antes desglosados (Tabla 7.1). Los valores de  $\mathbf{v}_\eta$  y  $\mathbf{w}_\eta$  en cada una de las superficies antes descritas son:

Tabla 7.1. Velocidades del fluido y de la frontera de la región- $\eta$  en cada una de sus superficies.

	$\mathcal{A}_{entrada}$	$\mathcal{A}_{salida}$	$\mathcal{A}_{difusor}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$	$\mathcal{A}_{flóculos}$	$\mathcal{A}_{burbujas}$	$\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$
$\mathbf{v}_\eta$	$\mathbf{v}_{\eta e}$	$\mathbf{v}_{\eta s}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\eta sup}$	$\mathbf{v}_{\eta \omega}$	$\mathbf{v}_{\eta \gamma}$	$\mathbf{v}_{\eta \lambda}$
$\mathbf{w}_\eta$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\eta sup}$	$\mathbf{v}_{\eta \omega}$	$\mathbf{v}_{\eta \gamma}$	$\mathbf{v}_{\eta \lambda}$

Puede observarse que la superficie de la región- $\eta$  con la entrada y la salida del tanque no presentan movimiento por ser estos componentes inmóviles; es por esto que la velocidad de la interfase corresponde a un vector nulo. Para el caso de la superficie con el difusor, el enfoque del análisis es a la zona del mismo que está en contacto con la región, en esa sección de los difusores tanto la región- $\eta$  como la frontera se encuentran en reposo. Una situación similar ocurre en la superficie con las paredes del tanque. En las superficies de la región- $\eta$  con la atmósfera, con la región- $\omega$ , con la fase- $\gamma$  y con la fase- $\lambda$ , la velocidad de la frontera se considera la misma que la de

la región- $\eta$ . De acuerdo con lo anterior, la versión macroscópica de la ecuación de continuidad está dada por:

$$\frac{dV_{\eta}}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\eta e}} \mathbf{n}_{\eta e} \cdot \mathbf{v}_{\eta e} dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta s}} \mathbf{n}_{\eta s} \cdot \mathbf{v}_{\eta s} dA = 0 \quad (7.6)$$

Como puede notarse, solamente permanecen los términos de las superficies de entrada y salida del tanque. Ahora, considerando que  $\mathbf{n}_{\eta e} \cdot \mathbf{v}_{\eta e} = -v_{\eta e}$  y  $\mathbf{n}_{\eta s} \cdot \mathbf{v}_{\eta s} = v_{\eta s}$ , la ecuación anterior queda de la siguiente forma:

**Modelo 7.1.1 — Modelo macroscópico para el transporte de masa total en la región- $\eta$ .**

$$\frac{dV_{\eta}}{dt} = \dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta} \quad (7.7)$$

donde  $\dot{Q}_{e\eta}$  y  $\dot{Q}_{s\eta}$  representan el flujo volumétrico de entrada de la región líquida a través de la alimentación y de la salida del tanque aerobio, respectivamente. Estos flujos volumétricos se definen como:

$$\dot{Q}_{e\eta} = \int_{\mathcal{A}_{\eta e}} v_{\eta e} dA; \quad \dot{Q}_{s\eta} = \int_{\mathcal{A}_{\eta s}} v_{\eta s} dA \quad (7.8)$$

La ecuación (7.7) representa el modelo macroscópico para el transporte de masa total en la región- $\eta$ , la cual define el cambio en volumen que experimenta la región a través del tiempo, en función de los flujos volumétricos de entrada y salida del tanque aerobio, y será de utilidad en los desarrollos posteriores.

### 7.1.2 Región- $\gamma$

La ecuación de continuidad en la fase gaseosa es:

$$\frac{\partial \rho_{\gamma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\gamma} \mathbf{v}_{\gamma}) = 0 \quad (7.9)$$

donde el significado físico de  $\rho_{\gamma}$  y  $\mathbf{v}_{\gamma}$  es similar a los reportados arriba para la región- $\eta$ . Llevando a cabo un proceso de integración análogo, seguido del uso de los teoremas general del transporte y

de la divergencia, se deduce la siguiente expresión bajo condiciones de flujo incompresible

$$\frac{dV_\gamma}{dt} + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot (\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{w}_\gamma) dA = 0 \quad (7.10)$$

La superficie del fluido ( $\mathcal{A}_\gamma$ ) presente en el segundo término de la ecuación anterior puede descomponerse de la siguiente forma:

$$\mathcal{A}_\gamma = \mathcal{A}_{difusor} + \mathcal{A}_{paredes} + \mathcal{A}_{superior} + \mathcal{A}_{flóculos} + \mathcal{A}_{gotas\ oleosas} + \mathcal{A}_{líquido} \quad (7.11)$$

Los valores de  $\mathbf{v}_\gamma$  y  $\mathbf{w}_\gamma$  en cada una de estas superficies están dados en la Tabla 7.2.

Tabla 7.2. Velocidades del fluido y de la frontera de la fase- $\gamma$  en cada una de sus superficies.

	$\mathcal{A}_{difusor}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$	$\mathcal{A}_{flóculos}$	$\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$	$\mathcal{A}_{líquido}$
$\mathbf{v}_\gamma$	$\mathbf{v}_{\gamma d}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\gamma sup}$	$\mathbf{v}_{\gamma \omega}$	$\mathbf{v}_{\gamma \lambda}$	$\mathbf{v}_{\gamma \eta}$
$\mathbf{w}_\gamma$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{w}_{\gamma sup}$	$\mathbf{v}_{\gamma \omega}$	$\mathbf{v}_{\gamma \lambda}$	$\mathbf{v}_{\gamma \eta}$

De acuerdo a lo anterior, se supone que las burbujas de aire no salen del tanque por la conexión con el tanque de membrana, únicamente por la superficie del líquido en el tanque aerobio. Bajo estas condiciones y suponiendo que la velocidad de la interfase es despreciable con respecto a la velocidad de las burbujas, la versión macroscópica de la ecuación de continuidad es:

$$\frac{dV_\gamma}{dt} + \int_{\mathcal{A}_{\gamma d}} \mathbf{n}_{\gamma d} \cdot \mathbf{v}_{\gamma d} dA + \int_{\mathcal{A}_{\gamma sup}} \mathbf{n}_{\gamma sup} \cdot \mathbf{v}_{\gamma sup} dA = 0 \quad (7.12)$$

Considerando las identidades:  $\mathbf{n}_{\gamma d} \cdot \mathbf{v}_{\gamma d} = -v_{\gamma d}$  y  $\mathbf{n}_{\gamma sup} \cdot \mathbf{v}_{\gamma sup} = v_{\gamma sup}$ , es posible reescribir la ecuación (7.12) como sigue:

**Modelo 7.1.2 — Modelo macroscópico de transporte de masa total en la fase- $\gamma$ .**

$$\frac{dV_\gamma}{dt} = \dot{Q}_{d\gamma} - \dot{Q}_{sup\gamma} \quad (7.13)$$

donde  $\dot{Q}_{d\gamma}$  y  $\dot{Q}_{sup\gamma}$  representan los flujos volumétricos de entrada de la fase gas por el dispersor y de salida por la superficie del líquido en el tanque, respectivamente. Estos flujos están definidos

como:

$$\dot{Q}_{d\gamma} = \int_{\mathcal{A}_{\gamma d}} v_{\gamma d} dA; \quad \dot{Q}_{sup\gamma} = \int_{\mathcal{A}_{\gamma sup}} v_{\gamma sup} dA \quad (7.14)$$

La ecuación (7.13) corresponde a la ecuación macroscópica de transporte de masa total para la fase- $\gamma$ . Con esta ecuación se concluye esta sección y a continuación se llevará a cabo el escalamiento de las ecuaciones que gobiernan el transporte de las especies químicas.

## 7.2 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie A

En la región- $\eta$  no ocurren reacciones químicas de la especie A y el transporte se da tanto por difusión como por convección en estado no estacionario. Bajo estas condiciones, la ecuación gobernante del transporte de esta especie al nivel de escala microscópico es la siguiente:

$$\frac{\partial c_{A\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta}) = 0, \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.15)$$

donde  $c_{A\eta}$  es la concentración molar de especie A en la región- $\eta$  y  $\mathbf{v}_{A\eta}$  es la velocidad de la especie A en la región- $\eta$ . El primer término representa a la acumulación de la especie A con respecto al tiempo, mientras que el segundo denota al transporte convectivo y difusivo de la especie A.

La descripción del transporte de masa en la región- $\omega$  requiere contar con una ecuación que involucre a las múltiples fases a nivel de escala de flóculo y a un término de reacción que represente a la oxidación (consumo) de la especie A. Para describir el transporte de masa en esta región se modifica la ecuación propuesta por de los Santos-Sánchez y *col.* (2016). El modelo original considera tres poblaciones celulares (proliferantes, quiescentes y necróticas); sin embargo, para adaptarlo al sistema bajo estudio se consideran sólo dos, las cuales corresponden en este trabajo a células que consumen a la especie A (región- $P_A$ ) y células que, por diversas razones, no la consumen (región- $N_A$ ). La cinética de reacción propuesta es de tipo Michaelis-Menten, la cual es no lineal y no considera la inhibición por sustrato. De esta forma, se presenta el modelo de medio efectivo que describe el transporte de masa en la región- $\omega$ :

$$\left( \varepsilon_{P_A} K_{A_j}^{-1} + \varepsilon_{e_j} \right) \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial t} = D_{A_j} \nabla^2 c_{A\omega j} - \varepsilon_{P_A} \mu_{A P_A} \frac{c_{A\omega j}}{c_{A\omega j} + \alpha_{P_A}}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.16)$$

para  $j$  tamaños de flóculo ( $j=1, \dots, Nf$ ). Para el primer término,  $\varepsilon_{P_A j}$  es la fracción volumétrica de la región  $P_A$  en el  $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ ,  $K_{A j}$  es la constante de equilibrio termodinámico que relaciona a la concentración de la especie  $A$  entre la región extracelular (región- $e$ ) y la región  $P_A$  para el tamaño  $j$  de la región- $\omega$  y  $\varepsilon_{e j}$  es la fracción volumétrica de la región extracelular en el tamaño  $j$  de la región- $\omega$ . En el primer término del lado derecho,  $D_{A j}$  se define como el coeficiente de difusividad efectiva de la especie  $A$  asociado al modelo de equilibrio al considerar que el transporte de masa a escala celular es isótropo. Este coeficiente se puede predecir a partir de la solución del problema de cerradura asociado (de los Santos-Sánchez y *col.*, 2016), por lo tanto, se considera conocido a este nivel de escala. Finalmente, en cuanto al segundo término del lado derecho,  $\mu_{A P_A j}$  es la tasa máxima de consumo de la especie  $A$  en la región- $P_A$  en su  $j$ -ésimo tamaño, y  $\alpha_{P_A}$  es la constante media de saturación de la especie  $A$ .

La ecuación (7.16), en su primer término del lado izquierdo, describe la acumulación de especie  $A$  en función del tiempo, su primer término del lado derecho expresa el transporte de masa por difusión efectiva de la especie dentro de la región- $\omega$ , mientras que el segundo término del lado derecho representa el consumo (oxidación) de la especie  $A$  dentro de la región  $P_A$ . Esta ecuación se dedujo por medio de promedio volumétrico, y ya no distingue entre cada componente de la región- $\omega$ .

Para cerrar esta sección, vale la pena comentar que, debido a que la fase- $\lambda$  (fase oleosa) contiene G&A con distinta estructura química con respecto a la que se transporta en las regiones  $\eta$  y  $\omega$ , no es necesario considerarla para el modelo. La información proporcionada en esta sección es suficiente para llevar a cabo el proceso de promediado de las ecuaciones de transporte de la especie  $A$ , el cual se presenta a continuación únicamente en la región- $\eta$ .

En la frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\lambda$  se da una reacción de generación de la especie  $A$ , debido a la reacción de hidrólisis de las G&A. Despreciando las contribuciones de la acumulación y transporte superficiales y tomando en cuenta que los flóculos no sufren cambios en su superficie, la ecuación que describe el transporte en la frontera puede ser escrita como:

$$\mathbf{n}_{\eta\lambda} \cdot c_{A\eta}(\mathbf{v}_{A\eta} - \mathbf{w}_{\eta\lambda i}) = -k_{\lambda\eta} c_{\lambda}, \quad \text{en la frontera } \eta\lambda i \tag{7.17}$$

para  $i$  tamaños de gota ( $i = 1, \dots, Ng$ ), y donde  $\mathbf{n}_{\eta\lambda}$  es el vector unitario dirigido de la región- $\eta$  a la fase- $\lambda$  y  $\mathbf{w}_{\eta\lambda i}$  es velocidad de la frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\lambda$  en su  $i$ -ésimo tamaño.

Además,  $k_{\lambda\eta}$  es la constante de reacción (de hidrólisis) en la frontera entre la región- $\eta$  y la gota de tamaño  $i$  de la fase- $\lambda$  y  $c_\lambda$  corresponde a la concentración molar de la frontera entre la región- $\omega$  y la fase- $\lambda$ .

Una vez disuelta en la región- $\eta$ , la especie  $A$  es transportada hasta los flóculos (región- $\omega$ ). Es importante mencionar que se desprecian las reacciones en la frontera entre ambas regiones con respecto a la reacción dentro de los flóculos. Además, despreciando las contribuciones de la acumulación y transporte superficiales, respecto al flux perpendicular a la inter-región, y tomando en cuenta que los flóculos no sufren cambios en su superficie, se obtiene la siguiente condición de continuidad del flux entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$ :

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{A\eta}(\mathbf{v}_{A\eta} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}) = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{A\omega j}(\mathbf{v}_{A\omega j} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}), \quad \text{en la inter-región } \eta\omega j \quad (7.18)$$

donde  $\mathbf{n}_{\eta\omega}$  es el vector unitario dirigido de la región- $\eta$  a la región- $\omega$  y  $\mathbf{w}_{\eta\omega j}$  representa a velocidad de la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$  en su  $j$ -ésimo tamaño. Mientras que  $c_{A\omega j}$  se refiere a la concentración molar de la especie  $A$  en la región- $\omega$  y  $\mathbf{v}_{A\omega j}$  expresa la velocidad de la especie  $A$  en la región- $\omega$ , ambas en su  $j$ -ésimo tamaño.

También, dado que existen resistencias a la transferencia de masa en esta misma frontera, se tiene la siguiente condición, cuya forma asemeja a la ley de enfriamiento de Newton:

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{A\eta}(\mathbf{v}_{A\eta} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}) = k_{Aj}^{\eta\omega}(c_{A\eta} - c_{A\omega j}), \quad \text{en la inter-región } \eta\omega j \quad (7.19)$$

donde  $k_{Aj}^{\eta\omega}$  es el coeficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre las regiones  $\eta$  y  $\omega$ .

Finalmente, es necesario escribir una condición de frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ . Se sabe que no existe transporte de la especie  $A$  de la región- $\eta$  a la fase- $\gamma$ , por lo tanto:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot c_{A\eta}(\mathbf{v}_{A\eta} - \mathbf{w}_{\eta\gamma}) = 0, \quad \text{en la frontera } \eta\gamma \quad (7.20)$$

donde la velocidad de la frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$  se expresa como  $\mathbf{w}_{\eta\gamma}$ .

### 7.3 Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie A en la región- $\eta$

Para comenzar con el proceso de promediado, se integra la ecuación (7.15) en  $\mathcal{V}_\eta$  a fin de obtener:

$$\int_{\mathcal{V}_\eta} \frac{\partial c_{A\eta}}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_\eta} \nabla \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta}) dV = 0 \quad (7.21)$$

Aplicando los teoremas de la divergencia y general del transporte, la ecuación anterior toma la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\eta} c_{A\eta} dV + \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot c_{A\eta} (\mathbf{v}_{A\eta} - \mathbf{w}_\eta) dA = 0 \quad (7.22)$$

donde el primer término del lado izquierdo se puede expresar como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\eta} c_{A\eta} dV = V_\eta \frac{dc_A^\eta}{dt} + c_A^\eta \frac{dV_\eta}{dt} = V_\eta \frac{dc_A^\eta}{dt} + c_A^\eta (\dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta}) \quad (7.23)$$

aquí,  $c_A^\eta$  representa el promedio intrínseco de la concentración de la especie A en la región- $\eta$  y está definido como:

$$c_A^\eta = \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{V}_\eta} c_{A\eta} dV \quad (7.24)$$

En la última igualdad de la ecuación (7.23) se substituyó el resultado de la versión macroscópica de la ecuación de continuidad para esta región, dado por la ecuación (7.7).

Ahora, y de la misma forma que con la ecuación de continuidad, es oportuno considerar la descomposición de las superficies de contacto de la región- $\eta$  (Tabla 7.3) para trabajar el término de transporte interfacial para la especie A de la ecuación (7.22).

Tabla 7.3. Velocidad de la especie A en las superficies de la región- $\eta$ .

	$\mathcal{A}_{entrada}$	$\mathcal{A}_{salida}$	$\mathcal{A}_{difusor}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$	$\mathcal{A}_{flóculos}$	$\mathcal{A}_{burbujas}$	$\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$
$\mathbf{v}_{A\eta}$	$\mathbf{v}_{\eta e}$	$\mathbf{v}_{\eta s}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\eta sup}$	$\mathbf{v}_{A\eta \omega}$	$\mathbf{v}_{A\eta \gamma}$	$\mathbf{v}_{A\eta \lambda}$

En la descomposición anterior se supone que en las superficies de entrada y salida (por la conexión con el tanque de membrana), la velocidad de la especie  $A$  es predominantemente la velocidad convectiva, es decir, la velocidad del fluido en la región- $\eta$ . Para la superficie del líquido en el tanque se supone que no hay intercambio de la especie  $A$  con la atmósfera y que el movimiento de la especie en esta zona será por lo tanto el mismo que para la región- $\eta$ . Se supone que, por el uso de antiespumantes durante la operación del MBR, la especie  $A$  que pueda estar en la espuma es despreciable con respecto a la especie  $A$  disuelta en la región- $\eta$ . Además, se supone que la especie  $A$  no se adhiere a las paredes y no forma una película en la superficie del líquido en el tanque. Bajo estas condiciones, la ecuación (7.22) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 V_{\eta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} (\dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta}) + \int_{\mathcal{A}_{\eta e}} \mathbf{n}_{\eta e} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta e} dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta s}} \mathbf{n}_{\eta s} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta s} dA \\
 + \int_{\mathcal{A}_{\eta \omega}} \mathbf{n}_{\eta \omega} \cdot c_{A\eta} (\mathbf{v}_{A\eta \omega} - \mathbf{w}_{\eta \omega}) dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta \gamma}} \mathbf{n}_{\eta \gamma} \cdot c_{A\eta} (\mathbf{v}_{A\eta \gamma} - \mathbf{w}_{\eta \gamma}) dA \\
 + \int_{\mathcal{A}_{\eta \lambda}} \mathbf{n}_{\eta \lambda} \cdot c_{A\eta} (\mathbf{v}_{A\eta \lambda} - \mathbf{w}_{\eta \lambda}) dA = 0
 \end{aligned} \tag{7.25}$$

Para continuar con este análisis, se lleva a cabo la sustitución de las condiciones de frontera para la especie  $A$  en los filtros interfaciales correspondientes. Así también, se adopta una serie de suposiciones que permitan simplificar el modelo resultante.

Bajo condiciones de mezclado perfecto, es razonable aproximar a la concentración en la frontera  $\eta \omega$  por su valor promedio. Además, aplicando las condiciones de frontera, dadas por las ecuaciones (7.19), (7.20) y (7.17), la ecuación (7.25) puede ser reescrita como sigue:

$$\begin{aligned}
 V_{\eta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} (\dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta}) + \int_{\mathcal{A}_{\eta e}} \mathbf{n}_{\eta e} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta e} dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta s}} \mathbf{n}_{\eta s} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta s} dA \\
 + \sum_{j=1}^{j=Nf} k_{Aj}^{\eta \omega} A_{\eta \omega j} (c_A^{\eta} - c_{A\omega j}) - k_{\lambda \eta} c_{\lambda} A_{\eta \lambda} = 0
 \end{aligned} \tag{7.26}$$

donde  $k_{\lambda \eta}$  y  $c_{\lambda} A_{\eta \lambda}$  se suponen constantes, además de que  $A_{\eta \lambda} = \sum_{i=1}^{i=Ng} A_{\eta \lambda i}$ .

A consecuencia de la suposición de mezclado perfecto, la concentración a la salida del tanque será igual a la concentración promedio dentro del mismo. De esta forma, la expresión anterior se

reduce a:

$$V_{\eta} \frac{dc_A^{\eta}}{dt} + c_A^{\eta} \dot{Q}_{e\eta} + \int_{\mathcal{A}_{\eta e}} \mathbf{n}_{\eta e} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta e} dA + \sum_{j=1}^{j=Nf} k_{Aj}^{\eta\omega} A_{\eta\omega j} (c_A^{\eta} - c_{A\omega j}) - k_{\lambda\eta} c_{\lambda} A_{\eta\lambda} = 0 \quad (7.27)$$

Finalmente, suponiendo que la concentración de la especie A a la entrada del tanque aerobio ( $c_{A\eta e}$ ) es constante, la ecuación anterior puede escribirse como:

**Modelo 7.3.1 — Modelo macroscópico de transporte de masa de la especie A en la región- $\eta$ .**

$$\underbrace{\frac{dc_A^{\eta}}{dt}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{\dot{Q}_{e\eta}}{V_{\eta}} (c_{A\eta e} - c_A^{\eta})}_{\text{Flujo neto de entrada}} - \underbrace{\sum_{j=1}^{j=Nf} \frac{k_{Aj}^{\eta\omega} A_{\eta\omega j}}{V_{\eta}} (c_A^{\eta} - c_{A\omega j})}_{\text{Intercambio con los flóculos}} + \underbrace{\frac{k_{\lambda\eta} c_{\lambda} A_{\eta\lambda}}{V_{\eta}}}_{\text{Reacción}} \quad (7.28)$$

En este modelo macroscópico, la acumulación de especie A en la región- $\eta$  depende de tres términos principales. El primero es la cantidad de especie que entra al tanque menos aquella que sale, de acuerdo con el primer término del lado derecho de la ecuación anterior. El segundo factor que repercute en la acumulación es la cantidad de especie A que es transportada hacia los flóculos (término de intercambio), a mayor especie transportada, menor será la tasa de acumulación. Finalmente, el término de reacción (hidrólisis) funge como fuente de especie A para el modelo. Como puede notarse, para resolver el modelo es necesario acoplarlo con la ecuación (7.16) que describe el transporte en la región- $\omega$ , así como con la ecuación (7.7) que expresa el cambio en los flujos volumétricos de la región- $\eta$  en función del tiempo. La solución numérica de este modelo se aborda en el capítulo 9. Por el momento la atención se centra en la definición de las ecuaciones de transporte de masa a nivel microscópico de la especie B, y su respectivo escalamiento.

## 7.4 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa para la especie B

Dado que no tienen lugar reacciones químicas en la fase- $\gamma$ , la ecuación de continuidad que gobierna la transferencia de masa de la especie B en esta fase toma la siguiente forma:

$$\frac{\partial c_{B\gamma}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{B\gamma} \mathbf{v}_{B\gamma}) = 0, \quad \text{en la fase } \gamma \quad (7.29)$$

donde  $c_{B\gamma}$  se define como la concentración molar de la especie B en la fase- $\gamma$  y  $\mathbf{v}_{B\gamma}$  es la velocidad

de la especie  $B$  en esta misma fase.

La ecuación para el transporte de masa a escala microscópica en la región- $\eta$  es idéntica a aquella descrita para la fase- $\gamma$  y puede expresarse como:

$$\frac{\partial c_{B\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{B\eta} \mathbf{v}_{B\eta}) = 0, \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.30)$$

Para describir el transporte de oxígeno en los flóculos (región- $\omega$ ), se modifica la ecuación propuesta por de los Santos-Sánchez y col. (2016), adoptando las mismas suposiciones descritas para la especie  $A$ , donde es importante recordar que existen dos tipos de células, aquellas que consumen a la especie  $B$  (región- $P_B$ ) y aquellas que no la consumen (región- $N_B$ ). Con lo anterior, el modelo que describe el transporte de masa en la región- $\omega$  es el siguiente:

$$\left( \varepsilon_{P_B j} K_{Bj}^{-1} + \varepsilon_{e j} \right) \frac{\partial c_{B\omega j}}{\partial t} = D_{Bj} \nabla^2 c_{B\omega j} - \varepsilon_{P_B j} \mu_{BP_B j} \frac{c_{B\omega j}}{c_{B\omega j} + \alpha_{P_B}}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.31)$$

donde el significado físico de los términos y coeficientes involucrados en esta ecuación son equivalentes a los de la ecuación (7.16) en la región- $\omega$  para la especie  $A$ .

En la frontera entre la fase- $\gamma$  y la región- $\eta$  es razonable desprestigiar las contribuciones de la acumulación y transporte superficiales con respecto al transporte perpendicular, y tomando en cuenta que las burbujas de aire no sufren cambios en su superficie, se tiene la siguiente expresión:

$$\mathbf{n}_{\gamma\eta} \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma} - \mathbf{w}_{\gamma\eta}) = \mathbf{n}_{\gamma\eta} \cdot c_{B\eta} (\mathbf{v}_{B\eta} - \mathbf{w}_{\gamma\eta}), \quad \text{en la frontera } \gamma\eta \quad (7.32)$$

donde  $\mathbf{n}_{\gamma\eta}$  denota al vector normal que va de la fase- $\gamma$  a la región- $\eta$ ,  $\mathbf{w}_{\gamma\eta}$  es la velocidad de la frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$  y  $c_{B\eta}$  se define como la concentración de la especie  $B$  en la región- $\eta$ .

Además, dado que existen resistencias a la transferencia de masa entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ , se tiene la siguiente condición de frontera:

$$\mathbf{n}_{\gamma\eta} \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma} - \mathbf{w}_{\gamma\eta}) = k^\eta (c_{B\gamma} - c_{B\eta}), \quad \text{en la frontera } \gamma\eta \quad (7.33)$$

donde  $k^\eta$  es el coeficiente interfacial de transferencia de masa entre la fase- $\gamma$  y la región- $\eta$ .

Así también, dado que no hay transporte de oxígeno en las fronteras con la fase- $\lambda$  y región- $\omega$ , se tienen las siguientes condiciones de frontera:

$$\mathbf{n}_{\gamma\lambda} \cdot c_{B\gamma}(\mathbf{v}_{B\gamma} - \mathbf{w}_{\gamma\lambda}) = 0, \quad \text{en la frontera } \gamma\lambda \quad (7.34)$$

$$\mathbf{n}_{\gamma\omega} \cdot c_{B\gamma}(\mathbf{v}_{B\gamma} - \mathbf{w}_{\gamma\omega j}) = 0, \quad \text{en la frontera } \gamma\omega \quad (7.35)$$

donde  $\mathbf{n}_{\gamma\lambda}$  y  $\mathbf{n}_{\gamma\omega}$  son los vectores que van de la fase- $\gamma$  a la fase- $\lambda$  y de la fase- $\gamma$  a la región- $\omega$ , respectivamente. Además de que  $\mathbf{w}_{\gamma\lambda}$  es la velocidad de la interfase  $\gamma - \lambda$ , y  $\mathbf{w}_{\gamma\omega j}$  la velocidad de la frontera entre la fase- $\gamma$  y el  $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ .

Se supone que la región- $\omega$  no sufre cambios en su superficie, además, se desprecian las contribuciones de la acumulación y transporte superficiales entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$ . Considerando lo anterior, se define la siguiente condición de continuidad del flux:

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{B\eta}(\mathbf{v}_{B\eta} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}) = \mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{B\omega j}(\mathbf{v}_{B\omega j} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}), \quad \text{en la inter-región } \eta\omega j \quad (7.36)$$

donde  $j = 1, \dots, Nf$ .

En la frontera entre la región- $\eta$  y región- $\omega$  existen además resistencias a la transferencia de masa, por lo tanto se tiene la siguiente condición de frontera:

$$\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot c_{B\eta}(\mathbf{v}_{B\eta} - \mathbf{w}_{\eta\omega j}) = k_{Bj}^{\eta\omega}(c_{B\eta} - c_{B\omega j}), \quad \text{en la inter-región } \eta\omega j \quad (7.37)$$

donde  $k_{Bj}^{\eta\omega}$  se define como el coeficiente interfacial de transferencia de masa entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$ .

Finalmente, y debido a que no existe transporte de la especie  $B$  entre la región- $\eta$  y la fase- $\lambda$ , se define la siguiente condición en la frontera:

$$\mathbf{n}_{\eta\lambda} \cdot c_{B\eta}(\mathbf{v}_{B\eta} - \mathbf{w}_{\eta\lambda}) = 0, \quad \text{en la frontera } \eta\lambda \quad (7.38)$$

## 7.5 Promediado y escalamiento de las ecuaciones de transporte de masa de la especie $B$

A diferencia del promediado para la transferencia de masa de la especie  $A$ , en esta sección se requiere procesar las ecuaciones de transporte de la especie  $B$  tanto en la fase- $\gamma$  como en la región- $\eta$ . A continuación se llevan a cabo estos desarrollos.

### 7.5.1 Fase- $\gamma$

Integrando la ecuación (7.29) en  $\mathcal{V}_\gamma$  se tiene la siguiente expresión:

$$\int_{\mathcal{V}_\gamma} \frac{\partial c_{B\gamma}}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_\gamma} \nabla \cdot (c_{B\gamma} \mathbf{v}_{B\gamma}) dV = 0 \quad (7.39)$$

O bien, tras la aplicación de los teoremas de la divergencia y general del transporte:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} c_{B\gamma} dV + \int_{\mathcal{A}_\gamma} \mathbf{n}_\gamma \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma} - \mathbf{w}_\gamma) dA = 0 \quad (7.40)$$

donde el primer término del lado izquierdo de la ecuación anterior se puede expresar como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\gamma} c_{B\gamma} dV = V_\gamma \frac{dc_B^\gamma}{dt} + c_B^\gamma \frac{dV_\gamma}{dt} = V_\gamma \frac{dc_B^\gamma}{dt} + c_B^\gamma (\dot{Q}_{d\gamma} - \dot{Q}_{sup\gamma}) \quad (7.41)$$

en la cual se ha sustituido el resultado de la versión macroscópica de la ecuación de conservación de masa total en la fase- $\gamma$  (ver ecuación (7.13)) así como la definición del promedio intrínseco de la concentración de la especie  $B$  en la fase- $\gamma$ . Aquí,  $c_B^\gamma$  expresa la concentración promedio de la especie  $B$  en la fase- $\gamma$ .

Se considera ahora la siguiente descomposición (Tabla 7.4) para trabajar el término del transporte interfacial de la ecuación (7.40):

Tabla 7.4. Velocidad de la especie  $B$  en las superficies de la fase- $\gamma$ .

	$\mathcal{A}_{difusor}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$	$\mathcal{A}_{flóculos}$	$\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$	$\mathcal{A}_{líquido}$
$\mathbf{v}_{B\gamma}$	$\mathbf{v}_{\gamma d}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\gamma sup}$	$\mathbf{v}_{B\gamma\omega}$	$\mathbf{v}_{B\gamma\lambda}$	$\mathbf{v}_{B\gamma\eta}$

De acuerdo con lo anterior, se supone que a la entrada de la fase- $\gamma$  (por el difusor) y a su salida (por la superficie del líquido en el tanque), la velocidad de la especie  $B$  es predominantemente la velocidad convectiva, es decir, la velocidad de la fase- $\gamma$ . Además, despreciando la velocidad con la

que se desplaza la interfase en la superficie del líquido con respecto a la velocidad de la especie  $B$ , la ecuación (7.41) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 & V_\gamma \frac{dc_B^\gamma}{dt} + c_B^\gamma (\dot{Q}_{d\gamma} - \dot{Q}_{sup\gamma}) + \int_{\mathcal{A}_{\gamma d}} \mathbf{n}_{\gamma d} \cdot c_{B\gamma d} \mathbf{v}_{\gamma d} dA + \int_{\mathcal{A}_{\gamma sup}} \mathbf{n}_{\gamma sup} \cdot c_{B\gamma sup} \mathbf{v}_{\gamma sup} dA \\
 & + \int_{\mathcal{A}_{\gamma \omega}} \mathbf{n}_{\gamma \omega} \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma \omega} - \mathbf{w}_{\gamma \omega}) dA + \int_{\mathcal{A}_{\gamma \lambda}} \mathbf{n}_{\gamma \lambda} \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma \lambda} - \mathbf{w}_{\gamma \lambda}) dA \\
 & + \int_{\mathcal{A}_{\gamma \eta}} \mathbf{n}_{\gamma \eta} \cdot c_{B\gamma} (\mathbf{v}_{B\gamma \eta} - \mathbf{w}_{\gamma \eta}) dA = 0 \tag{7.42}
 \end{aligned}$$

Aplicando las condiciones de frontera dadas en las ecuaciones (7.34) y (7.33). Además, suponiendo condiciones de mezclado perfecto (Cristóvão y col., 2015; Sánchez y col., 2018; Huang y col., 2020) tanto en la fase- $\gamma$  como en la región- $\eta$ , las concentraciones de la especie  $B$  en la frontera pueden ser aproximadas por las concentraciones promedio. Considerando lo anterior, y que la concentración de la especie  $B$  es constante a la entrada por el difusor, se obtiene la siguiente expresión:

$$V_\gamma \frac{dc_B^\gamma}{dt} + c_B^\gamma (\dot{Q}_{d\gamma} - \dot{Q}_{sup\gamma}) - c_{B\gamma d} \dot{Q}_{d\gamma} + \int_{\mathcal{A}_{\gamma sup}} \mathbf{n}_{\gamma sup} \cdot c_{B\gamma sup} \mathbf{v}_{\gamma sup} dA + k^{\gamma \eta} A_{\gamma \eta} (c_B^\gamma - c_B^\eta) = 0 \tag{7.43}$$

Finalmente, y debido a la suposición de mezcla perfecta, se supone que la concentración de la especie  $B$  en la superficie de salida del tanque es igual a la concentración promedio, por lo tanto la ecuación anterior toma la siguiente forma:

**Modelo 7.5.1 — Modelo macroscópico de transporte de masa de la especie  $B$  en la fase- $\gamma$ .**

$$\underbrace{\frac{dc_B^\gamma}{dt}}_{\text{Acumulación}} = \underbrace{\frac{\dot{Q}_{d\gamma}}{V_\gamma} (c_{B\gamma d} - c_B^\gamma)}_{\text{Flujo neto de entrada}} - \underbrace{\frac{k^{\gamma \eta} A_{\gamma \eta}}{V_\gamma} (c_B^\gamma - c_B^\eta)}_{\text{Intercambio}} \tag{7.44}$$

Este modelo macroscópico indica que la acumulación de la especie  $B$  en la fase- $\gamma$  se incrementa debido al suministro de aire por el difusor, pero se verá reducida por la salida del gas a través de la superficie del tanque, y por el transporte de la especie  $B$  hacia la región- $\eta$ .

### 7.5.2 Región- $\eta$

A continuación se lleva a cabo el promediado de la ecuación que describe el transporte de masa de la especie  $B$  en la región- $\eta$ . Para ello, se integra la ecuación (7.30) en  $\mathcal{V}_\eta$  para obtener:

$$\int_{\mathcal{V}_\eta} \frac{\partial c_{B\eta}}{\partial t} dV + \int_{\mathcal{V}_\eta} \nabla \cdot (c_{B\eta} \mathbf{v}_{B\eta}) dV = 0 \quad (7.45)$$

Aplicando los teoremas de la divergencia y general del transporte, se obtiene:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\eta} c_{B\eta} dV + \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \cdot c_{B\eta} (\mathbf{v}_{B\eta} - \mathbf{w}_\eta) dA = 0 \quad (7.46)$$

donde el primer término del lado izquierdo de la ecuación anterior se puede expresar, una vez sustituido el resultado de la versión macroscópica de la ecuación de continuidad, como:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\eta} c_{B\eta} dV = V_\eta \frac{dc_B^\eta}{dt} + c_B^\eta \frac{dV_\eta}{dt} = V_\eta \frac{dc_B^\eta}{dt} + c_B^\eta (\dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta}) \quad (7.47)$$

Así como en los desarrollos anteriores, aquí es oportuno considerar la descomposición para trabajar el término de transporte interfacial (Tabla 7.5).

Tabla 7.5. Velocidad de la especie  $B$  en las superficies de la región- $\eta$ .

	$\mathcal{A}_{salida}$	$\mathcal{A}_{difusor}$	$\mathcal{A}_{paredes}$	$\mathcal{A}_{superior}$	$\mathcal{A}_{flóculos}$	$\mathcal{A}_{burbujas}$	$\mathcal{A}_{gotas\ oleosas}$
$\mathbf{v}_{B\eta}$	$\mathbf{v}_{\eta s}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{v}_{\eta sup}$	$\mathbf{v}_{B\eta \omega}$	$\mathbf{v}_{B\eta \gamma}$	$\mathbf{v}_{B\eta \lambda}$

Note que en los datos anteriores no se considera una contribución de entrada ya que la corriente de la región- $\eta$  que ingresa al sistema no contiene a la especie  $B$ . Esto se debe a que en el tanque de recepción no se suministra aire y que durante su estadía ahí se consume todo el oxígeno que pudiese tener el agua residual antes de su llegada al tanque aerobio. Se supone también que en la superficie de salida (por la conexión con el tanque de membrana), la velocidad de la especie  $B$  es predominantemente la velocidad convectiva, es decir, la velocidad de fluido en la región- $\eta$ . Además, no hay intercambio de masa entre la región líquida y el exterior del tanque (atmósfera). Bajo estas condiciones, la ecuación (7.46) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
V_\eta \frac{dc_B^\eta}{dt} + c_B^\eta (\dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta}) + \int_{\mathcal{A}_{\eta s}} \mathbf{n}_{\eta s} \cdot c_{B\eta} \mathbf{v}_{\eta s} dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta \omega}} \mathbf{n}_{\eta \omega} \cdot c_{B\eta} (\mathbf{v}_{B\eta \omega} - \mathbf{w}_{\eta \omega}) dA \\
+ \int_{\mathcal{A}_{\eta \gamma}} \mathbf{n}_{\eta \gamma} \cdot c_{B\eta} (\mathbf{v}_{B\eta \gamma} - \mathbf{w}_{\eta \gamma}) dA + \int_{\mathcal{A}_{\eta \lambda}} \mathbf{n}_{\eta \lambda} \cdot c_{B\eta} (\mathbf{v}_{B\eta \lambda} - \mathbf{w}_{\eta \lambda}) dA = 0
\end{aligned} \quad (7.48)$$

Aplicando las condiciones de frontera dadas por las ecuaciones (7.33), (7.37), (7.38), y bajo la suposición de mezcla perfecta, donde la concentración a la salida del tanque es igual a la concentración promedio dentro del mismo, la ecuación anterior puede ser escrita como:

**Modelo 7.5.2 — Modelo macroscópico de transporte de masa de la especie  $B$  en la región- $\eta$ .**

$$\underbrace{\frac{dc_B^\eta}{dt}}_{\text{Acumulación}} = - \underbrace{\frac{\dot{Q}_{e\eta} c_B^\eta}{V_\eta}}_{\text{Flujo de salida}} - \underbrace{\sum_{j=1}^{j=Nf} \frac{k_{Bj}^{\eta \omega} A_{\eta \omega j}}{V_\eta} (c_B^\eta - c_{B\omega j})}_{\text{Intercambio con la región-}\omega} - \underbrace{\frac{k^{\eta \gamma} A_{\eta \gamma}}{V_\eta} (c_B^\eta - c_B^\gamma)}_{\text{Intercambio con la fase-}\gamma} \quad (7.49)$$

Este modelo macroscópico debe ser acoplado con la ecuación (7.44), dado para la fase- $\gamma$ ; así como con la ecuación (7.31) que describe el transporte de la especie  $B$  dentro de la región- $\omega$ . Así también se necesita conocer el cambio en los flujos volumétricos de la región- $\eta$  y  $\gamma$  para resolver este conjunto de ecuaciones. Estos flujos pueden conocerse a partir de las ecuaciones (7.7) y (7.13), respectivamente.

Los modelos deducidos en este capítulo tienen la ventaja, sobre modelos postulados, de permitir la identificación de las suposiciones y restricciones de escala utilizadas. Esto hace posible, dadas diferentes condiciones en el tanque, redefinir las suposiciones y obtener un nuevo modelo fácilmente.

## 7.6 Resumen de modelos macroscópicos

### 7.6.1 Especie $A$

Para la especie  $A$  se cuenta con dos ecuaciones, una para la región líquida en el tanque (región- $\eta$ ) y otra para describir el transporte en los flocúlos (región- $\omega$ ), además de una condición de frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$  donde se aplica la ley de Fick. También, se considera que en esta región existe simetría de la concentración de la especie  $A$  con respecto a la posición, que las

concentraciones iniciales, así como el valor de  $c_\lambda$ , son conocidas ( $c_\lambda=1.46\text{g L}^{-1}$ ) (Liu y *col.*, 2003, 2004b; Kurian y *col.*, 2005; Acharya y *col.*, 2006c,b; Nakhla y *col.*, 2006). En resumen, el problema de valor inicial y a la frontera resultante del escalamiento para la especie  $A$  es el siguiente:

$$\frac{dc_A^\eta}{dt} = \frac{\dot{Q}_{e\eta}}{V_\eta} (c_{A\eta e} - c_A^\eta) - \sum_{j=1}^{j=Nf} \frac{k_{Aj}^{\eta\omega} A_{\eta\omega j}}{V_\eta} (c_A^\eta - c_{A\omega j}) + \frac{k_{\lambda\eta} c_\lambda A_{\eta\lambda}}{V_\eta}, \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.50a)$$

$$\left( \varepsilon_{P_{Aj}} K_{Aj}^{-1} + \varepsilon_{ej} \right) \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial t} = D_{Aj} \nabla^2 c_{A\omega j} - \varepsilon_{P_{Aj}} \mu_{AP_{Aj}} \frac{c_{A\omega j}}{c_{A\omega j} + \alpha_{P_A}}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.50b)$$

$$-\mathbf{n}_{\eta\omega} \cdot D_{Aj} \nabla c_{A\omega j} = k_{Aj}^{\eta\omega} (c_{A\eta} - c_{A\omega j}), \quad \text{en la inter-región-}\eta\omega j \quad (7.50c)$$

$$\mathbf{n}_{\omega\eta} \cdot \nabla c_{A\omega j} = 0, \quad \text{en el centroide de la región-}\omega j \quad (7.50d)$$

$$\text{Cuando } t = 0, \quad c_A^\eta = c_{A0}^\eta, \quad c_{A\omega j} = c_{A\omega j0} \quad (7.50e)$$

Así también se tiene una ecuación para representar el cambio en volumen de la región- $\eta$ :

$$\frac{dV_\eta}{dt} = \dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta} \quad (7.51)$$

Este modelo proporciona información acerca de los cambios espacio-temporales de la concentración de AGCL en los flóculos (región- $\omega$ ). Además, las ecuaciones permiten evaluar los cambios temporales de la concentración de AGCL en la región líquida (región- $\eta$ ).

Debido a la necesidad de describir el transporte de la especie  $A$  en función de la posición dentro de los flóculos, es conveniente considerarlos como regiones esféricas que presentan simetrías angulares y azimutales. De esta forma, la ecuación que describe el transporte de masa en la región- $\omega$ , así como la condición de frontera y de simetría de esta región pueden escribirse como sigue:

$$\left( \varepsilon_{P_{Aj}} K_{Aj}^{-1} + \varepsilon_{ej} \right) \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial t} = \frac{D_{Aj}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial r} \right) - \varepsilon_{P_{Aj}} \mu_{AP_{Aj}} \frac{c_{A\omega j}}{c_{A\omega j} + \alpha_{P_A}}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.52a)$$

$$\text{En } r = R_j, \quad D_{Aj} \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial r} = k_{Aj}^{\eta\omega} (c_{A\eta} - c_{A\omega j}) \quad (7.52b)$$

$$\text{En } r = 0, \quad \frac{\partial c_{A\omega j}}{\partial r} = 0 \quad (7.52c)$$

donde  $r$  es la coordenada radial y  $R_j$  representa el radio de cada tamaño de flóculo. En adelante,  $R_f$  denota el radio del tamaño de flóculo más grande.

Como puede notarse en las ecuaciones anteriores, el problema dimensional requiere de varios

parámetros para poder resolverse. De hecho, para llevar a cabo la validación del modelo es necesario conocer cada uno de estos parámetros dimensionales, sin embargo esto no se encuentra dentro del alcance de esta tesis. Entonces, para resolver estos problemas es conveniente reformular las ecuaciones que describen el transporte de masa de la especie  $A$  en términos de las variables adimensionales:

$$\begin{aligned}
 D_A^* &= \frac{D_A}{\mathcal{D}_{A\beta}}, R_f = \max(R_j), R_j^* = \frac{R_j}{R_f}, r^* = \frac{r}{R_f}, t_A^* = \frac{t_A}{t_{DA}}, t_{DA} = \frac{R_f^2}{\mathcal{D}_{A\beta}}, c_A^{\eta*} = \frac{c_A^\eta}{c_\lambda}, \\
 c_{A\eta e}^* &= \frac{c_{A\eta e}}{c_\lambda}, c_{A\omega j}^* = \frac{c_{A\omega j}}{c_\lambda}, \alpha_{P_A}^* = \frac{\alpha_{P_A}}{c_\lambda}, \mu_{AP_A j}^* = \frac{\mu_{AP_A j} t_{DA}}{c_\lambda}, \varepsilon_\eta = \frac{V_\eta}{V}, \dot{Q}_{e\eta}^* = \frac{\dot{Q}_{e\eta} t_{DA}}{V}, \\
 \dot{Q}_{s\eta}^* &= \frac{\dot{Q}_{s\eta} t_{DA}}{V}, a_{\eta\lambda}^* = \frac{A_{\eta\lambda} R_f}{V}, a_{A\eta\omega j}^* = \frac{A_{\eta\omega j} R_f}{V}
 \end{aligned} \tag{7.53}$$

donde  $*$  denota la adimensionalidad del número.  $D_A^*$  es la relación entre el coeficiente de difusividad efectiva y el coeficiente de difusividad molecular, ambos para la especie  $A$ .  $t_A^*$  es el tiempo adimensional para la especie  $A$  y  $t_{DA}$  es el tiempo característico de la difusión para la especie  $A$ .  $\varepsilon_\eta$  se define como la fracción volumétrica de la región- $\eta$ ,  $a_{\eta\lambda}^*$  es el área interfacial entre la región- $\eta$  y la fase- $\lambda$ ,  $a_{A\eta\omega j}^*$  el área interfacial entre las regiones  $\eta$  y  $\omega$  (en su  $j$ -ésimo tamaño).

Las explicaciones del flujo volumétrico adimensional y del área interfacial de transferencia de masa pueden ser profundizadas, de acuerdo con su significado físico de la siguiente forma:

**Definición 7.6.1 — Flujo volumétrico adimensional.** Es el inverso del tiempo de difusión de la especie en el tanque, con lo cual entre mayor sea su magnitud, más rápido será el tránsito de la especie a través del volumen del tanque. Por el lado contrario, magnitudes menores indican un largo tiempo de proceso, lo cual es ideal para este tipo de tratamientos de aguas residuales. Al dividir el flujo volumétrico entre el volumen del reactor, se obtiene el inverso del tiempo de retención de la especie en el tanque.

**Definición 7.6.2 — Área interfacial adimensional de transferencia de masa.** Es un indicador de la cantidad de flóculos o gotas oleosas que estarán presentes en el tanque, dependiendo de si se habla del área interfacial de uno u otro dominio, ya que relaciona la suma de todas sus áreas superficiales con el volumen total del reactor.

Además, se utilizan las siguientes definiciones de números adimensionales, incluyendo el significado físico que poseen.

**Definición 7.6.3 — Número de Biot para transferencia de masa.** Relaciona la tasa de transferencia de masa por convección con respecto a la transferencia de masa por difusión en una frontera. Se puede interpretar como la razón entre las resistencias internas respecto a las resistencias externas a la transferencia de masa. A valores de Biot pequeños ( $< 1$ ) cobra importancia el término difusivo, esto se interpreta como que el gradiente de concentración estará poco marcado. Mientras que para un Biot mayor a uno las resistencias generarán que el gradiente sea mayor entre las dos zonas bajo estudio.

$$Bi_{Aj} = \frac{k_{Aj}^{\eta\omega} R_f}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (7.54)$$

donde  $Bi_{Aj}$  representa el número de Biot para la especie  $A$  entre las regiones  $\eta$  y  $\omega$  en su  $j$ -ésimo tamaño

**Definición 7.6.4 — Módulo de Thiele.** Relaciona la tasa de reacción con la tasa de difusión. Éste es útil para determinar la eficacia de la reacción de hidrólisis de G&A. A valores por arriba de uno la reacción es rápida mientras que la difusión es lenta y limita la tasa general de hidrólisis. Por el lado contrario, valores por debajo de uno del módulo de Thiele representan una reacción hidrolítica lenta con difusión rápida.

$$\phi_{\lambda\eta}^2 = \frac{k_{\lambda\eta} R_f}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (7.55)$$

donde  $\phi_{\lambda\eta}^2$  representa el módulo de Thiele en la frontera entre la fase- $\lambda$  y la región- $\eta$ .

La practicidad del uso de números y parámetros adimensionales radica en la fácil interpretación que poseen varios de ellos, y que existen en la literatura reportes de los valores que éstos pueden adquirir (ver Tabla 9.1). Además, de esta forma se reduce el número de parámetros a especificar y se pueden hacer comparaciones de relaciones en lugar de alargar el análisis paramétrico con un número considerable de grados de libertad. Para el caso particular del modelo de transporte y reacción para la especie  $A$ , los grados de libertad se reducen de  $21^1$  a tan sólo  $13^2$ . Todo lo anterior sin restar información al modelo. Además, esto permite que la solución numérica a desarrollar en el capítulo 9 no esté limitada a condiciones experimentales específicas.

<sup>1</sup>  $\dot{Q}_{e\eta}, \dot{Q}_{s\eta}, V_\eta, c_{A\eta e}, k_{Aj}^{\eta\omega}, A_{\eta\omega j}, k_{\lambda\eta}, c_\lambda, A_{\eta\lambda}, \varepsilon_{P_A}, K_{A_j}, \varepsilon_{e_j}, D_{A_j}, \mu_{AP_A j}, \alpha_{P_A}, c_{A0}^\eta, c_{A\omega j0}, R_j, R_f, \mathcal{D}_{A\beta}, V$

<sup>2</sup>  $\dot{Q}_{e\eta}^*, \dot{Q}_{s\eta}^*, a_{A\eta\omega j}^*, a_{\eta\lambda}^*, \varepsilon_\eta, D_A^*, \mu_{AP_A j}^*, \alpha_{P_A}^*, R_j^*, c_{A0}^{\eta*}, c_{A\omega j0}^*, Bi_{Aj}, \phi_{\lambda\eta}^2$

De esta forma, las ecuaciones adimensionales que describen el transporte de masa de la especie A son:

$$\frac{dc_A^{\eta*}}{dt_A^*} = \frac{\dot{Q}_{e\eta}^*}{\varepsilon_\eta} (c_{A\eta e}^* - c_A^{\eta*}) - \sum_{j=1}^{j=Nf} \frac{a_{A\eta\omega j}^* Bi_{Aj}}{\varepsilon_\eta} (c_A^{\eta*} - c_{A\omega j}^*) + \frac{a_{\eta\lambda}^* \phi_{\lambda\eta}^2}{\varepsilon_\eta}, \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.56a)$$

$$\left( \varepsilon_{PAj} K_{Aj}^{-1} + \varepsilon_{ej} \right) \frac{\partial c_{A\omega j}^*}{\partial t_A^*} = \frac{D_{Aj}^*}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^{*2} \frac{\partial c_{A\omega j}^*}{\partial r^*} \right) - \varepsilon_{PAj} \mu_{APAj}^* \frac{c_{A\omega j}^*}{c_{A\omega j}^* + \alpha_{PA}^*}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.56b)$$

$$\text{En } r^* = R_j^*, \quad D_{Aj}^* \frac{\partial c_{A\omega j}^*}{\partial r^*} = Bi_{Aj} (c_{A\eta}^* - c_{A\omega j}^*) \quad (7.56c)$$

$$\text{En } r^* = 0, \quad \frac{\partial c_{A\omega j}^*}{\partial r^*} = 0 \quad (7.56d)$$

$$\text{Cuando } t^* = 0, \quad c_A^{\eta*} = c_{A0}^{\eta*}, \quad c_{A\omega j}^* = c_{A\omega j0}^* \quad (7.56e)$$

$$\frac{d\varepsilon_\eta}{dt_A^*} = \dot{Q}_{e\eta}^* - \dot{Q}_{s\eta}^* \quad (7.56f)$$

### 7.6.2 Especie B

Para la especie B, se tienen tres ecuaciones que describen el transporte de masa en el tanque aerobio, la de la fase gas (fase- $\gamma$ ), la de la región líquida (región- $\eta$ ) y la de los flóculos (región- $\omega$ ). Además, se cuenta con una condición de frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\omega$ , donde se desprecia la velocidad de la inter-región debido a que los flóculos son rígidos y se aplica la ley de Fick. También se conocen las concentraciones iniciales y se supone simetría en la región- $\omega$ , bajo un sistema coordenado esférico. Considerando lo anterior, el problema de valor inicial y a la frontera que representa el modelo macroscópico para la especie B es el siguiente:

$$\frac{dc_B^\gamma}{dt} = \frac{\dot{Q}_{d\gamma}}{V_\gamma} (c_{B\gamma d} - c_B^\gamma) - \frac{k^\gamma A_{\gamma\eta}}{V_\gamma} (c_B^\gamma - c_B^\eta), \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (7.57a)$$

$$\frac{dc_B^\eta}{dt} = -\frac{\dot{Q}_{e\eta}}{V_\eta} c_B^\eta - \sum_{j=1}^{j=Nf} \frac{k_{Bj}^{\eta\omega} A_{\eta\omega j}}{V_\eta} (c_B^\eta - c_{B\omega j}) - \frac{k^\gamma A_{\eta\gamma}}{V_\eta} (c_B^\eta - c_B^\gamma), \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.57b)$$

$$\left( \varepsilon_{PBj} K_{Bj}^{-1} + \varepsilon_{ej} \right) \frac{\partial c_{B\omega j}}{\partial t} = \frac{D_{Bj}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_{B\omega j}}{\partial r} \right) - \varepsilon_{PBj} \mu_{BPBj} \frac{c_{B\omega j}}{c_{B\omega j} + \alpha_{PB}} \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.57c)$$

$$\text{En } r = R_j, \quad D_B \frac{\partial c_{B\omega j}}{\partial r} = k_{Bj}^{\eta\omega} (c_{B\eta} - c_{B\omega j}) \quad (7.57d)$$

$$\text{En } r = 0, \quad \frac{\partial c_{B\omega j}}{\partial r} = 0 \quad (7.57e)$$

$$\text{Cuando } t = 0, \quad c_B^\gamma = c_{B0}^\gamma, \quad c_B^\eta = c_{B0}^\eta, \quad c_{B\omega j} = c_{B\omega j0} \quad (7.57f)$$

$$c_{B\gamma d} = 8.7 \frac{\text{mg}}{\text{L}} \quad (7.57g)$$

Note que en la última ecuación, el valor reportado para  $c_{B\gamma d}$  corresponde con la solubilidad máxima del oxígeno en agua a 20°C (Girard, 2005).

De forma similar al modelo para la especie  $A$ , este conjunto de ecuaciones proporciona información acerca de los cambios espacio-temporales de la concentración de oxígeno en los flóculos (región- $\omega$ ). Además, el modelo permite evaluar los cambios temporales de la concentración de oxígeno en la región líquida (región- $\eta$ ).

También se tienen dos ecuaciones para describir el cambio en volumen de la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ :

$$\frac{dV_\eta}{dt} = \dot{Q}_{e\eta} - \dot{Q}_{s\eta} \quad (7.58a)$$

$$\frac{dV_\gamma}{dt} = \dot{Q}_{d\gamma} - \dot{Q}_{sup\gamma} \quad (7.58b)$$

Para la especie  $B$  se utilizan los siguientes cambios de variable y números adimensionales:

$$\begin{aligned} D_B^* &= \frac{D_B}{\mathcal{D}_{B\beta}}, \quad r^* = \frac{r}{R_f}, \quad t_B^* = \frac{t_B}{t_{D_B}}, \quad t_{D_B} = \frac{R_f^2}{\mathcal{D}_{B\beta}}, \quad c_B^{\gamma*} = \frac{c_B^\gamma}{c_{B\gamma d}}, \quad c_B^{\eta*} = \frac{c_B^\eta}{c_{B\gamma d}}, \quad c_{B\omega j}^* = \frac{c_{B\omega j}}{c_{B\gamma d}}, \\ \alpha_{P_B}^* &= \frac{\alpha_{P_B}}{c_{B\gamma d}}, \quad \mu_{BP_B j}^* = \frac{\mu_{BP_B j} t_{D_B}}{c_{B\gamma d}}, \quad \varepsilon_\eta = \frac{V_\eta}{V}, \quad \varepsilon_\gamma = \frac{V_\gamma}{V}, \quad \dot{Q}_{e\eta}^* = \frac{\dot{Q}_{e\eta} t_{D_B}}{V}, \quad \dot{Q}_{s\eta}^* = \frac{\dot{Q}_{s\eta} t_{D_B}}{V}, \\ \dot{Q}_{d\gamma}^* &= \frac{\dot{Q}_{d\gamma} t_{D_B}}{V}, \quad \dot{Q}_{sup\gamma}^* = \frac{\dot{Q}_{sup\gamma} t_{D_B}}{V}, \quad Bi_{\gamma\eta} = \frac{k_{\gamma\eta} R_f}{\mathcal{D}_{B\beta}}, \quad a_{\eta\gamma}^* = \frac{A_{\eta\gamma} R_f}{V}, \quad a_{B\eta\omega j}^* = \frac{A_{\eta\omega j} R_f}{V}, \\ Bi_{Bj} &= \frac{k_{Bj}^\eta R_f}{\mathcal{D}_{B\beta}} \end{aligned} \quad (7.59)$$

donde  $\varepsilon_\gamma$  se define como la fracción volumétrica de la fase- $\gamma$  en el reactor,  $Bi_{\gamma\eta}$  representa al número de Biot entre la fase- $\gamma$  y la región- $\eta$ ,  $a_{\eta\gamma}^*$  es el área interfacial entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ . Estos números y parámetros adimensionales poseen los mismos significados físicos que para la especie  $A$ .

Con base en las definiciones anteriores, la forma adimensional del modelo macroscópico para la especie  $B$  es la siguiente:

$$\frac{dc_B^{\gamma*}}{dt_B^*} = \frac{\dot{Q}_{d\gamma}^*}{\varepsilon_\gamma} (1 - c_B^{\gamma*}) - \frac{a_{\eta\gamma}^* Bi_{\gamma\eta}}{\varepsilon_\gamma} (c_B^{\gamma*} - c_B^{\eta*}), \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (7.60a)$$

$$\frac{dc_B^{\eta*}}{dt_B^*} = -\frac{\dot{Q}_{e\eta}^*}{\varepsilon_\eta} c_B^{\eta*} - \sum_{j=1}^{j=N_f} \frac{a_{\eta\omega j}^* Bi_{Bj}}{\varepsilon_\eta} (c_B^{\eta*} - c_{B\omega j}^*) - \frac{a_{\eta\gamma}^* Bi_{\gamma\eta}}{\varepsilon_\eta} (c_B^{\eta*} - c_B^{\gamma*}), \quad \text{en la región-}\eta \quad (7.60b)$$

$$\left(\varepsilon_{P_{Bj}} K_{Bj}^{-1} + \varepsilon_{ej}\right) \frac{\partial c_{B\omega j}^*}{\partial t^*} = \frac{D_{Bj}^*}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left( r^{*2} \frac{\partial c_{B\omega j}^*}{\partial r^*} \right) - \varepsilon_{P_{Bj}} \mu_{BP_{Bj}}^* \frac{c_{B\omega j}^*}{c_{B\omega j}^* + \alpha_{P_B}^*}, \quad \text{en la región-}\omega j \quad (7.60c)$$

$$\text{En } r^* = R_j^*, \quad D_{Bj}^* \frac{\partial c_{B\omega j}^*}{\partial r^*} = Bi_{Bj} (c_{B\eta}^* - c_{B\omega j}^*) \quad (7.60d)$$

$$\text{En } r^* = 0, \quad \frac{\partial c_{B\omega j}^*}{\partial r^*} = 0 \quad (7.60e)$$

$$\text{Cuando } t^* = 0, \quad c_B^{\gamma*} = c_{B0}^{\gamma*}, \quad c_B^{\eta*} = c_{B0}^{\eta*}, \quad c_{B\omega j}^* = c_{B\omega j0}^* \quad (7.60f)$$

$$\frac{d\varepsilon_{\eta}}{dt_B^*} = \dot{Q}_{e\eta}^* - \dot{Q}_{s\eta}^* \quad (7.60g)$$

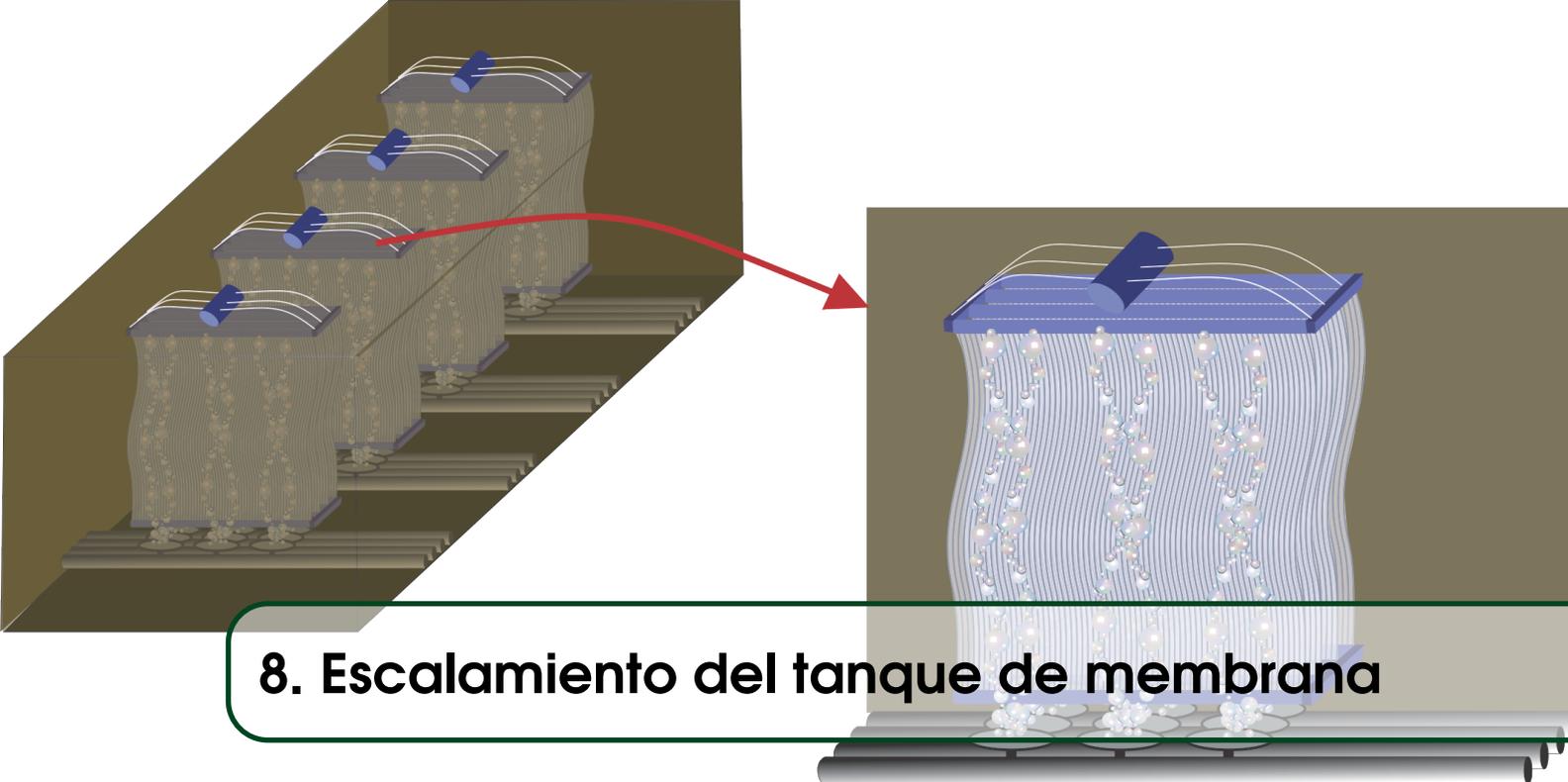
$$\frac{d\varepsilon_{\gamma}}{dt_B^*} = \dot{Q}_{d\eta}^* - \dot{Q}_{sup\eta}^* \quad (7.60h)$$

Es importante mencionar que  $k$  es un parámetro adimensional que describe la razón entre el coeficiente de difusión intracelular con respecto al coeficiente de difusión extracelular y que sólo está definido para células vivas. Este parámetro está involucrado en la solución para  $D_A^*$ , ya que se incorpora en la solución de Maxwell de la siguiente forma (Wood y Whitaker, 2000):

$$D_A^* = \frac{D_A}{\mathcal{D}_{Ae}} = \frac{3k - 2\varepsilon_e(k-1)}{3 + \varepsilon_e(k-1)} \quad (7.61)$$

donde  $\mathcal{D}_{Ae}$  es la difusividad molecular de la especie  $A$  en la matriz extracelular de los flóculos. Esta ecuación permite estimar al valor adimensional del coeficiente de difusividad efectiva de la especie  $A$  o  $B$ , utilizado en las ecuaciones para el transporte de masa en los flóculos.

Una vez planteados los modelos para ambas especies, puede procederse a resolverlos numéricamente. Esto se lleva a cabo en el capítulo 9 ya que el siguiente capítulo está dedicado al desarrollo de los modelos macroscópicos correspondientes al tanque de membrana.



## 8. Escalamiento del tanque de membrana

### Preliminares

En este capítulo se lleva a cabo el escalamiento del transporte de masa y cantidad de movimiento dentro de los casetes de ultrafiltración (región  $\zeta$ ). El objetivo es derivar modelos de medios efectivos para ambos tipos de fenómenos de transporte utilizando el método de promedio volumétrico bajo una aproximación de equilibrio local. El modelo matemático de este tanque, a diferencia del tanque aerobio, requiere del uso de una variedad de escalas (que van desde la escala de poro hasta el casete de ultrafiltración completo) como se detalla en la Figura 6.9. El modelo del casete de ultrafiltración involucra el escalamiento de las ecuaciones de transporte desde el nivel de escala IV hasta el I, y como resultado de este proceso se obtiene un modelo de medio efectivo. Este tipo de modelo permite representar a todas las fases y regiones que coexisten en el casete a través de una única ecuación. Para obtener este modelo se debe analizar, por un lado, el transporte de masa total y cantidad de movimiento, y por el otro, al transporte de masa de la especie  $A$ . No se llevará a cabo ningún escalamiento para la región- $\eta$  presente fuera de los casetes de ultrafiltración, ya que, a diferencia del tanque aerobio, en el tanque de membrana no es razonable imponer condiciones de mezclado perfecto. El capítulo está organizado en tres secciones principales: En la sección 8.1 se definen y desarrollan los modelos macroscópicos para transporte de masa total y cantidad de movimiento en el casete de ultrafiltración. En la sección 8.2 se escalan las ecuaciones que gobiernan

el transporte de masa de la especie  $A$ . En la sección 8.3 se recopilan las ecuaciones promedio a nivel macroscópico para el transporte de masa total, cantidad de movimiento y masa de la especie  $A$ , las cuales son adimensionalizadas. Los modelos resultantes se utilizan para llevar a cabo las simulaciones numéricas que se reportan en el capítulo 10.

## 8.1 Promediado y escalamiento del flujo de fluidos

### 8.1.1 Modelo para el flujo en la región- $\sigma$ del nivel de escala III

Debido a la disparidad de escalas entre los poros de las fibras huecas y las dimensiones de las mismas, resulta inviable modelar por separado a las fases que componen a la matriz de las fibras huecas. Por esta razón se comienza modelando el medio poroso como un continuo (región- $\sigma$ ), el cual corresponde con el nivel de escala III. Para esto, se plantean las ecuaciones de transporte y condiciones de frontera en el nivel IV.

En la fase fluida que satura los poros de las fibras, se proponen las ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes para describir el transporte de masa y de cantidad de movimiento, respectivamente, en la fase- $\beta$ , dando lugar así a las ecuaciones:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.1a)$$

$$\rho_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta = -\nabla \mathcal{P}_\beta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.1b)$$

donde  $\rho_\beta$  es la densidad,  $\mathbf{v}_\beta$  la velocidad y  $\mu$  la viscosidad, todas de la fase- $\beta$ . Además, se sustituyó la definición del gradiente de la presión dinámica:  $\nabla \mathcal{P}_\beta = \nabla p_\beta - \rho_\beta \mathbf{g}$ .

En la interfase sólido-fluido no hay transferencia de masa, por lo que es razonable imponer la siguiente condición de no deslizamiento:

$$\mathbf{v}_\beta = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\kappa} \quad (8.2)$$

donde  $\mathcal{A}_{\beta\kappa}$  es la frontera entre la fase- $\beta$  y la fase- $\kappa$  en los poros de las fibras huecas.

Dada la compleja geometría del medio poroso, es conveniente desarrollar las ecuaciones de transporte de masa total y cantidad de movimiento en términos de cantidades promedio. La deducción de la ecuación macroscópica para un medio poroso con estas características ha sido desarrollada por Whitaker (1996), mientras que la predicción del tensor de permeabilidad aparente

fue realizada por Lasseux *et al.* (2011). La solución formal del problema anterior, en una celda unitaria periódica, está dada por la siguiente ecuación:

$$\mathbf{v}_\beta = -\frac{\mathbf{D}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathcal{P}^\sigma, \quad \text{en la fase-}\beta, \text{ contenida en la región-}\sigma \quad (8.3)$$

donde  $\mathbf{D}_\sigma$  es una variable de cerradura que satisface el problema de cerradura dado en las ecuaciones (4.10) del trabajo de Whitaker (1996), y  $\mathcal{P}^\sigma$  se define como el promedio intrínseco de la presión dinámica en la fase- $\beta$ , dentro de la región- $\sigma$ .

Adoptando los resultados obtenidos por las referencias citadas, las ecuaciones promedio de continuidad y de transporte de cantidad de movimiento para este medio poroso toman la siguiente forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\sigma = 0, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.4a)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathcal{P}^\sigma, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.4b)$$

donde  $\mathbf{H}_\sigma = \langle \mathbf{D}_\beta \rangle_\beta$ . Además,  $\mathbf{v}_\sigma$  es la velocidad promedio superficial de la fase- $\beta$ ,  $\mathbf{H}_\sigma$  es el tensor de permeabilidad aparente de la fase- $\beta$  y  $\mu$  la viscosidad de la fase- $\beta$ , todos en la región- $\sigma$ .

Para describir el transporte de masa y de cantidad de movimiento en el casete de filtración, es posible visualizarlo como un sistema multifásico que está en contacto con un medio poroso. Para llevar a cabo este escalamiento es necesario utilizar a las ecuaciones promedio deducidas arriba, dadas para la región- $\sigma$ , y conjuntarlas con ecuaciones a deducir de la región- $\eta$ , la fase- $\gamma$  y la fase- $\beta$ .

### 8.1.2 Modelos de medio efectivo para el flujo en las regiones y fases del Nivel II

Las ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes pueden ser usadas para describir el transporte de masa total y el de cantidad de movimiento, respectivamente. De esta forma, las ecuaciones que rigen la hidrodinámica el nivel de escala II son:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\sigma = 0, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.5a)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathcal{P}^\sigma, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.5b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\eta = 0, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.5c)$$

$$\rho_\eta \mathbf{v}_\eta \cdot \nabla \mathbf{v}_\eta = -\nabla \mathcal{P}_\eta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\eta, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.5d)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\gamma = 0, \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (8.5e)$$

$$\rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma \cdot \nabla \mathbf{v}_\gamma = -\nabla \mathcal{P}_\gamma + \mu_\gamma \nabla^2 \mathbf{v}_\gamma, \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (8.5f)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.5g)$$

$$\rho_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta = -\nabla \mathcal{P}_\beta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\beta, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.5h)$$

donde  $\rho_\eta$  es la densidad,  $\mathbf{v}_\eta$  la velocidad y  $\mathcal{P}_\eta$  la presión dinámica, todas de la fase- $\eta$ , y donde definiciones análogas se pueden aplicar al resto de las fases y regiones. Además, la viscosidad del solvente en la región- $\eta$ , región- $\sigma$  y fase- $\beta$ , es aproximadamente la misma y se representa como  $\mu$ , mientras que  $\mu_\gamma$  es la viscosidad de la fase- $\gamma$ .

Para el caso de la región- $\eta$ , se supone que los sólidos presentes en esta región son inertes mecánicamente. Esto provoca que las ecuaciones que describen al transporte de cantidad de movimiento en la fase- $\beta$  y en la región- $\eta$  sean idénticas. Por esta razón,  $\mathbf{v}_\eta$  representa a la velocidad promedio para la fase- $\beta$  dentro de la región- $\eta$ .

Como se puede notar, aún se requiere definir las condiciones de frontera entre las fases y regiones presentes en una región de promediado del casete de filtración. Para esto se recurre a la forma vectorial de la ecuación propuesta por Beavers y Joseph (1967), la cual guarda concordancia estructural con la condición de deslizamiento de Navier (1822). Esta ecuación se utiliza cuando, para un fluido, la velocidad disminuye considerablemente en la frontera entre un medio poroso y el fluido, pero nunca es cero a menos que la porosidad también lo sea. Las expresiones resultantes, una vez sustituida la velocidad puntual en la región- $\sigma$  dada por la ecuación (8.4b), para las fronteras  $\mathcal{A}_{\beta\sigma}$  y  $\mathcal{A}_{\eta\sigma}$  pueden escribirse como sigue:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{n}_{\beta\sigma}) \cdot [\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\rho_\beta \mathbf{v}_\beta \mathbf{v}_\beta - \mu [\nabla \mathbf{v}_\beta + (\nabla \mathbf{v}_\beta)^T])] =$$

$$\frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{v}_\beta + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathcal{P}^\sigma \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (8.6a)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \mathbf{n}_{\eta\sigma}) \cdot [\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot (\rho_\eta \mathbf{v}_\eta \mathbf{v}_\eta - \mu [\nabla \mathbf{v}_\eta + (\nabla \mathbf{v}_\eta)^T])] = \\ & \frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{v}_\eta + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathcal{P}^\sigma \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (8.6b)$$

donde  $\alpha$  es un coeficiente de salto,  $\mathbf{n}_{\beta\sigma}$  y  $\mathbf{n}_{\eta\sigma}$  son los vectores normales que van de la fase- $\beta$  o región- $\eta$  a la región- $\sigma$ .

Más aún, de acuerdo con Ochoa-Tapia y Whitaker (1995), puede deducirse que en las fronteras entre las regiones  $\eta$  y  $\sigma$ , y  $\beta$  y  $\sigma$ , aplican las siguientes condiciones de continuidad de la componente normal de la velocidad:

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta = \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.7a)$$

$$\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\beta = \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\beta\sigma} \quad (8.7b)$$

En la frontera entre la fase- $\gamma$  y la región- $\sigma$ ,  $\mathcal{A}_{\gamma\sigma}$ , no se da transferencia de masa y se supone que el medio poroso es impermeable al aire. Por ello, se impone la siguiente condición de no deslizamiento:

$$\mathbf{v}_\gamma = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.8)$$

Queda aún pendiente una condición de frontera entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ ,  $\mathcal{A}_{\eta\gamma}$ . Aquí se supone que no hay intercambio de masa entre las fases, y con ello se puede imponer la continuidad de la velocidad. Además, se desprecian el transporte superficial, los efectos por el cambio en la superficie, el flujo de momento desde las fases y los esfuerzos volumétricos. De acuerdo con lo anterior, aplican las siguientes condiciones de frontera:

$$\mathbf{v}_\eta = \mathbf{v}_\gamma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.9a)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \mathbf{T}_\eta = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \mathbf{T}_\gamma + 2\sigma H_{\eta\gamma} \mathbf{n}_{\eta\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.9b)$$

donde  $\sigma$  representa la tensión superficial y  $H_{\eta\gamma}$  la curvatura media de la interfase  $\eta\gamma$ . Además,  $\mathbf{T}_\eta$  es el tensor total de esfuerzos para la región- $\eta$  y  $\mathbf{T}_\gamma$  el tensor total de esfuerzos para la fase- $\gamma$ .

La ecuación (8.9b) puede simplificarse sustituyendo la definición del tensor total de esfuerzos,

dicha ecuación se puede reescribir como:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-p_{\eta}\mathbf{l} + \mu [\nabla\mathbf{v}_{\eta} + (\nabla\mathbf{v}_{\eta})^T]) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-p_{\gamma}\mathbf{l} + \mu_{\gamma} [\nabla\mathbf{v}_{\gamma} + (\nabla\mathbf{v}_{\gamma})^T]) + 2\sigma H_{\eta\gamma}\mathbf{n}_{\eta\gamma} \quad (8.10)$$

Aplicando la descomposición de Gray para  $p_{\eta}$  y  $p_{\gamma}$ , se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (\tilde{p}_{\eta}\mathbf{l} - \mu [\nabla\mathbf{v}_{\eta} + (\nabla\mathbf{v}_{\eta})^T]) &= \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (\tilde{p}_{\gamma}\mathbf{l} - \mu_{\gamma} [\nabla\mathbf{v}_{\gamma} + (\nabla\mathbf{v}_{\gamma})^T]) + \langle p_{\gamma} \rangle^{\gamma} \\ &- \langle p_{\eta} \rangle^{\eta}\mathbf{n}_{\eta\gamma} - 2\sigma H_{\eta\gamma}\mathbf{n}_{\eta\gamma} \end{aligned} \quad (8.11)$$

Suponiendo que la geometría de las burbujas es esférica, es posible utilizar la ecuación de Young (1805)-Laplace (1805):

$$2\sigma \langle H_{\eta\gamma} \rangle_{\eta\gamma} \mathbf{n}_{\eta\gamma} = (\langle p_{\gamma} \rangle^{\gamma} - \langle p_{\eta} \rangle^{\eta}) \quad (8.12)$$

La curvatura media es el promedio interfacial de la curvatura local y se define como:

$$\langle H_{\eta\gamma} \rangle_{\eta\gamma} = \frac{1}{A_{\eta\gamma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} H_{\eta\gamma} dA \quad (8.13)$$

Bajo estas suposiciones, la condición de frontera, expresada en la ecuación (8.11), se reduce a lo siguiente:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (\tilde{p}_{\eta}\mathbf{l} - \mu [\nabla\mathbf{v}_{\eta} + (\nabla\mathbf{v}_{\eta})^T]) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (\tilde{p}_{\gamma}\mathbf{l} - \mu_{\gamma} [\nabla\mathbf{v}_{\gamma} + (\nabla\mathbf{v}_{\gamma})^T]), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.14)$$

Continuando con el análisis de esta condición de frontera, se define la presión dinámica de la siguiente forma:

$$\mathcal{P} = p - \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} \quad (8.15)$$

donde  $\mathbf{r}$  es un vector de posición. Aplicando el operador de promedio intrínseco para la región- $\eta$ , y debido a que el vector que define al centroide de la región de promediado guarda la siguiente

definición:  $\mathbf{x}_{\eta\gamma} = \langle \mathbf{r}_{\eta\gamma} \rangle^\eta$ , la expresión previa puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta = \langle p_\eta \rangle^\eta - \rho_\eta \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}_{\eta\gamma} \quad (8.16)$$

Ahora, restando a la ecuación puntual la expresión promedio para la presión dinámica resulta:

$$\widetilde{\mathcal{P}}_\eta = \widetilde{p}_\eta - \rho_\eta \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}_{\eta\gamma} \quad (8.17)$$

dado que  $\mathbf{r}_{\eta\gamma} = \mathbf{x}_{\eta\gamma} + \mathbf{y}_{\eta\gamma}$  (Whitaker, 1999).

Para la presión dinámica en la fase- $\gamma$  se lleva a cabo un desarrollo similar para obtener:

$$\widetilde{\mathcal{P}}_\gamma = \widetilde{p}_\gamma - \rho_\gamma \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}_{\eta\gamma} \quad (8.18)$$

Sustituyendo las ecuaciones (8.17) y (8.18) en la condición de frontera dada por la ecuación (8.14) y reacomodando términos se obtiene la siguiente expresión:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\eta \mathbf{l} + (\rho_\eta - \rho_\gamma) \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}_{\eta\gamma} \mathbf{l} - \mu [\nabla \mathbf{v}_\eta + (\nabla \mathbf{v}_\eta)^T] \right) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\gamma \mathbf{l} - \mu_\gamma [\nabla \mathbf{v}_\gamma + (\nabla \mathbf{v}_\gamma)^T] \right), \text{ en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.19)$$

Con la intención de simplificar la ecuación anterior se propone el siguiente estimado de orden de magnitud:

$$(\rho_\eta - \rho_\gamma) \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}_{\eta\gamma} \mathbf{l} = \mathbf{O}((\rho_\eta - \rho_\gamma) g y_{\eta\gamma}) \quad (8.20)$$

Y se supone que se cumple con la siguiente restricción:

$$(\rho_\eta - \rho_\gamma) g y_{\eta\gamma} \ll \max \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\eta, \widetilde{\mathcal{P}}_\gamma \right), \max \left( \mu [\nabla \mathbf{v}_\eta + (\nabla \mathbf{v}_\eta)^T], \mu_\gamma [\nabla \mathbf{v}_\gamma + (\nabla \mathbf{v}_\gamma)^T] \right) \quad (8.21)$$

Dado lo anterior, la ecuación (8.19) se reduce a su forma final:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\eta \mathbf{l} - \mu [\nabla \mathbf{v}_\eta + (\nabla \mathbf{v}_\eta)^T] \right) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\gamma \mathbf{l} - \mu_\gamma [\nabla \mathbf{v}_\gamma + (\nabla \mathbf{v}_\gamma)^T] \right), \text{ en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.22)$$

Con esta condición de frontera se completa el planteamiento del problema para el nivel de escala II. Ahora se procede al desarrollo del modelo promedio, comenzando con las ecuaciones de continuidad y posteriormente con las de cantidad de movimiento.

### Promediado de las ecuaciones de continuidad

Se inicia este desarrollo centrando la atención en la ecuación de continuidad para la región- $\eta$ . Aplicando el operador de promedio superficial (ver la ecuación (6.6.1)) a la ecuación de continuidad se obtiene la siguiente expresión:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta = 0 \quad (8.23)$$

Aplicando ahora el teorema de promediado espacial se obtiene que:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\eta dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta dA = 0 \quad (8.24)$$

Con el fin de simplificar este modelo, se sustituye la condición de continuidad de la velocidad entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$ , dada por la ecuación (8.9a):

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta dA = 0 \quad (8.25)$$

De forma similar, y a partir de la ecuación (8.5e), se obtiene la ecuación para la fase- $\gamma$ :

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle_\gamma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\eta}} \mathbf{n}_{\gamma\eta} \cdot \mathbf{v}_\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \mathbf{v}_\gamma dA = 0 \quad (8.26)$$

Con base en la condición de frontera dada en la ecuación (8.8), la ecuación anterior se reduce a lo siguiente:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle_\gamma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\gamma\eta}} \mathbf{n}_{\gamma\eta} \cdot \mathbf{v}_\gamma dA = 0 \quad (8.27)$$

Al sumar las ecuaciones (8.25) y (8.27), y tomando en cuenta que  $\mathbf{n}_{\eta\gamma} = -\mathbf{n}_{\gamma\eta}$  resulta en:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle_\gamma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta dA = 0 \quad (8.28)$$

Realizando un procedimiento similar, se promedia la ecuación (8.5g) para la fase- $\beta$  y se obtiene:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\beta dA = 0 \quad (8.29)$$

Finalmente, se promedia la ecuación (8.4b), siguiendo la misma metodología que para el resto de las fases y regiones. El resultado obtenido es:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\sigma \rangle_\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot \mathbf{v}_\sigma dA + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\sigma dA = 0 \quad (8.30)$$

Para simplificar la expresión anterior, se consideran a las ecuaciones (8.7), la cuales establecen continuidad de las componentes normales del vector velocidad entre  $\eta$  y  $\sigma$ , y entre  $\beta$  y  $\sigma$  en la frontera. Sumando la ecuación anterior con las ecuaciones (8.28) y (8.29), el modelo se reduce a:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle_\gamma + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta + \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\sigma \rangle_\sigma = 0 \quad (8.31)$$

Dada la definición del promedio superficial de la velocidad:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{v} dV = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\eta} \mathbf{v}_\eta dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\gamma} \mathbf{v}_\gamma dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{v}_\beta dV + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}_\sigma} \mathbf{v}_\sigma dV \quad (8.32)$$

es posible reescribir a la ecuación (8.31) como sigue:

#### Modelo 8.1.1 — Modelo macroscópico de conservación de masa total.

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (8.33)$$

La ecuación 8.33 corresponde al modelo macroscópico para el transporte de masa total. Sin embargo, es necesario ahora llevar a cabo la deducción del modelo para el transporte de cantidad de movimiento, el cual se desarrolla a continuación.

#### Promediado de las ecuaciones de cantidad de movimiento

Para el desarrollo del modelo macroscópico de conservación de cantidad de movimiento se supone que la geometría del sistema puede representarse de manera periódica en una celda unitaria. Bajo estas condiciones, se supone que la velocidad de cada fase es periódica en las superficies de entrada y salida de la celda unitaria, tal como se muestra en la Figura 8.1. Sin embargo, no se puede

aplicar esta suposición a la presión dinámica en cada fase, por lo que se recurre a la descomposición de Gray (1975) para expresarla en términos de su promedio intrínseco y desviaciones espaciales (con naturaleza periódica) de la siguiente forma:

$$\rho_\eta \mathbf{v}_\eta \cdot \nabla \mathbf{v}_\eta = -\nabla \tilde{\mathcal{P}}_\eta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\eta - \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.34a)$$

$$\rho_\gamma \mathbf{v}_\gamma \cdot \nabla \mathbf{v}_\gamma = -\nabla \tilde{\mathcal{P}}_\gamma + \mu_\gamma \nabla^2 \mathbf{v}_\gamma - \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma, \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (8.34b)$$

$$\rho_\beta \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta = -\nabla \tilde{\mathcal{P}}_\beta + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_\beta - \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.34c)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}^\sigma \rangle^\sigma - \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \tilde{\mathcal{P}}^\sigma, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.34d)$$

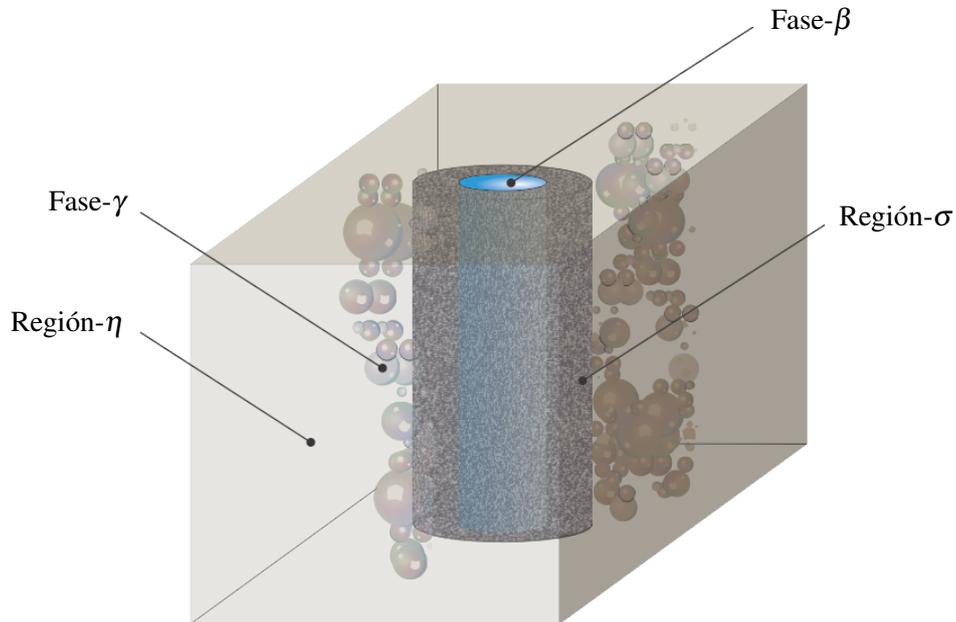


Figura 8.1. Esquema de una celda unitaria periódica con una geometría sencilla para representar al casete de ultrafiltración del tanque de membrana, identificando las fases y regiones involucradas.

Para este desarrollo resulta conveniente dividir las ecuaciones previas de cantidad de movimiento entre la viscosidad. Además, la descomposición espacial de Gray también afectará a las condiciones de frontera dadas por las ecuaciones (8.6). En resumen, el problema del flujo en la celda unitaria a resolver para este sistema multifásico es el siguiente:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\delta = 0, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \sigma, \beta \quad (8.35a)$$

$$\frac{\rho_\delta}{\mu_\delta} \mathbf{v}_\delta \cdot \nabla \mathbf{v}_\delta = -\frac{1}{\mu_\delta} \nabla \tilde{\mathcal{P}}_\delta + \nabla^2 \mathbf{v}_\delta - \frac{1}{\mu_\delta} \nabla \langle \mathcal{P}_\delta \rangle^\delta, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta \quad (8.35b)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}^\sigma \rangle^\sigma - \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \widetilde{\mathcal{P}}^\sigma, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.35c)$$

$$\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\delta = \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.35d)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\delta\sigma} \mathbf{n}_{\delta\sigma}) \cdot [\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot (\rho_\delta \mathbf{v}_\delta \mathbf{v}_\delta - \mu [\nabla \mathbf{v}_\delta + (\nabla \mathbf{v}_\delta)^T])] \\ &= \frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{v}_\delta + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}^\sigma \rangle^\sigma + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \widetilde{\mathcal{P}}^\sigma \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \end{aligned} \quad (8.35e)$$

$$\mathbf{v}_\gamma = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.35f)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\eta \mathbf{I} - \mu [\nabla \mathbf{v}_\eta + (\nabla \mathbf{v}_\eta)^T] \right) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot \left( \widetilde{\mathcal{P}}_\gamma \mathbf{I} - \mu_\gamma [\nabla \mathbf{v}_\gamma + (\nabla \mathbf{v}_\gamma)^T] \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.35g)$$

$$\mathbf{v}_\eta = \mathbf{v}_\gamma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.35h)$$

$$\psi_\delta(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \psi_\delta(\mathbf{r}_\delta), \quad \psi = \mathbf{v}, \widetilde{\mathcal{P}}, \quad \delta = \eta, \gamma, \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.35i)$$

$$\psi_\delta(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_3) = \psi_\delta(\mathbf{r}_\delta), \quad \psi = \mathbf{v}, \widetilde{\mathcal{P}}, \quad \delta = \beta, \sigma \quad (8.35j)$$

$$\langle \widetilde{\mathcal{P}}_\delta \rangle^\delta = 0, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.35k)$$

donde es importante mencionar que para la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$  se supone periodicidad en todas las direcciones; sin embargo, en la fase- $\beta$  y la región- $\sigma$  sólo se supone periodicidad en la dirección vertical  $\mathbf{l}_3$ .

Como puede notarse, en el problema anterior se identifican cuatro fuentes:  $\nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta$ ,  $\nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma$ ,  $\nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta$  y  $\nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma$ . Por tanto, se proponen las siguientes soluciones formales para las velocidades y las desviaciones espaciales de las presiones dinámicas:

$$\mathbf{v}_\delta = -\frac{\mathbf{D}_{\delta\eta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta - \frac{\mathbf{D}_{\delta\gamma}}{\mu_\gamma} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma - \frac{\mathbf{D}_{\delta\beta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta - \frac{\mathbf{D}_{\delta\sigma}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.36a)$$

$$\widetilde{\mathcal{P}}_\delta = -\frac{\mathbf{d}_{\delta\eta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta - \frac{\mathbf{d}_{\delta\gamma}}{\mu_\gamma} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma - \frac{\mathbf{d}_{\delta\beta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta - \frac{\mathbf{d}_{\delta\sigma}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.36b)$$

donde  $\mathbf{D}_{\delta\eta}$ ,  $\mathbf{D}_{\delta\gamma}$ ,  $\mathbf{D}_{\delta\beta}$ ,  $\mathbf{D}_{\delta\sigma}$ ,  $\mathbf{d}_{\delta\eta}$ ,  $\mathbf{d}_{\delta\gamma}$ ,  $\mathbf{d}_{\delta\beta}$  y  $\mathbf{d}_{\delta\sigma}$  son variables de cerradura que se encargan de mapear la influencia de cada fuente sobre la velocidad (variables de cerradura  $\mathbf{D}_{\delta j}$ , donde  $j = \eta, \gamma, \beta, \sigma$ ) y la presión (variables de cerradura  $\mathbf{d}_{\delta j}$ ). Estas variables, satisfacen los cuatro problemas de cerradura que se listan a continuación.

PROBLEMA I:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\delta\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.37a)$$

$$-\frac{\rho_\eta}{\mu^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta \cdot \mathbf{D}_{\eta\eta}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\eta\eta} = -\nabla \mathbf{d}_{\eta\eta} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\eta\eta} + \mathbf{I}, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.37b)$$

$$-\frac{\rho_\delta}{\mu_\delta^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta \cdot \mathbf{D}_{\delta\eta}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\delta\eta} = -\nabla \mathbf{d}_{\delta\eta} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\delta\eta}, \quad \text{en la fase-}\delta, \quad \delta = \gamma, \beta \quad (8.37c)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\eta}, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.37d)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\delta\sigma} \mathbf{n}_{\delta\sigma}) \cdot \left[ \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \left( \frac{\rho_\delta}{\mu} \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta \cdot \mathbf{D}_{\delta\eta}^T \mathbf{D}_{\delta\eta} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\delta\eta} + (\nabla \mathbf{D}_{\delta\eta})^{T1}] \right) \right] \\ &= -\frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{D}_{\delta\eta} + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\eta} \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \end{aligned} \quad (8.37e)$$

$$\mathbf{D}_{\gamma\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.37f)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\eta\eta} \mathbf{I} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\eta\eta} + (\nabla \mathbf{D}_{\eta\eta})^{T1}]) \\ &= \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\gamma\eta} \mathbf{I} + \mu_\gamma [\nabla \mathbf{D}_{\gamma\eta} + (\nabla \mathbf{D}_{\gamma\eta})^{T1}]), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \end{aligned} \quad (8.37g)$$

$$\mathbf{D}_{\eta\eta} = \mathbf{D}_{\gamma\eta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.37h)$$

$$\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\delta\eta} = \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\sigma\eta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.37i)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\eta}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \mathbf{D}_{\delta\eta}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \eta, \gamma, \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.37j)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\eta}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_3) = \mathbf{D}_{\delta\eta}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \beta, \sigma \quad (8.37k)$$

$$\langle \mathbf{d}_{\delta\eta} \rangle^\delta = \mathbf{0}, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.37l)$$

donde el superíndice  $T1$  indica la permuta de los dos primeros índices del tensor de tercer orden.

PROBLEMA II:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\delta\gamma} = \mathbf{0}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.38a)$$

$$-\frac{\rho_\delta}{\mu_\delta^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma \cdot \mathbf{D}_{\delta\gamma}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\delta\gamma} = -\nabla \mathbf{d}_{\delta\gamma} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\delta\gamma}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.38b)$$

$$-\frac{\rho_\gamma}{\mu_\gamma^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma \cdot \mathbf{D}_{\gamma\gamma}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\gamma\gamma} = -\nabla \mathbf{d}_{\gamma\gamma} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\gamma\gamma} + \mathbf{I}, \quad \text{en la fase-}\gamma \quad (8.38c)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\gamma}, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.38d)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\delta\sigma} \mathbf{n}_{\delta\sigma}) \cdot \left[ \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \left( \frac{\rho_\delta}{\mu} \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma \cdot \mathbf{D}_{\delta\gamma}^T \mathbf{D}_{\delta\gamma} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\delta\gamma} + (\nabla \mathbf{D}_{\delta\gamma})^{T1}] \right) \right] \\ &= -\frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{D}_{\delta\gamma} + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\gamma} \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \end{aligned} \quad (8.38e)$$

$$\mathbf{D}_{\gamma\gamma} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.38f)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\eta\gamma} \mathbf{l} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\eta\gamma} + (\nabla \mathbf{D}_{\eta\gamma})^{T1}]) = \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\gamma\gamma} \mathbf{l} + \mu_\gamma [\nabla \mathbf{D}_{\gamma\gamma} + (\nabla \mathbf{D}_{\gamma\gamma})^{T1}]), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.38g)$$

$$\mathbf{D}_{\eta\gamma} = \mathbf{D}_{\gamma\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.38h)$$

$$\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\delta\gamma} = \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\sigma\gamma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.38i)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\gamma}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \mathbf{D}_{\delta\gamma}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \eta, \gamma, \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.38j)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\gamma}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_3) = \mathbf{D}_{\delta\gamma}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \beta, \sigma \quad (8.38k)$$

$$\langle \mathbf{d}_{\delta\gamma} \rangle^\delta = \mathbf{0}, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.38l)$$

PROBLEMA III:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\delta\beta} = \mathbf{0}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.39a)$$

$$-\frac{\rho_\delta}{\mu_\delta^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{D}_{\delta\beta}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\delta\beta} = -\nabla \mathbf{d}_{\delta\beta} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\delta\beta}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma \quad (8.39b)$$

$$-\frac{\rho_\beta}{\mu^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{D}_{\beta\beta}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\beta\beta} = -\nabla \mathbf{d}_{\beta\beta} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\beta\beta} + \mathbf{l}, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.39c)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\beta}, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.39d)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{l} - \mathbf{n}_{\delta\sigma} \mathbf{n}_{\delta\sigma}) \cdot \left[ \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \left( \frac{\rho_\delta}{\mu} \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{D}_{\delta\beta}^T \mathbf{D}_{\delta\beta} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\delta\beta} + (\nabla \mathbf{D}_{\delta\beta})^{T1}] \right) \right] \\ &= -\frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{D}_{\delta\beta} + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\beta} \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \end{aligned} \quad (8.39e)$$

$$\mathbf{D}_{\gamma\beta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.39f)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\eta\beta} \mathbf{l} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\eta\beta} + (\nabla \mathbf{D}_{\eta\beta})^{T1}]) \\ &= \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\gamma\beta} \mathbf{l} + \mu_\gamma [\nabla \mathbf{D}_{\gamma\beta} + (\nabla \mathbf{D}_{\gamma\beta})^{T1}]), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \end{aligned} \quad (8.39g)$$

$$\mathbf{D}_{\eta\beta} = \mathbf{D}_{\gamma\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.39h)$$

$$\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\delta\beta} = \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\sigma\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.39i)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\beta}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \mathbf{D}_{\delta\beta}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \eta, \gamma, \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.39j)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\beta}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_3) = \mathbf{D}_{\delta\beta}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \beta, \sigma \quad (8.39k)$$

$$\langle \mathbf{d}_{\delta\beta} \rangle^\delta = \mathbf{0}, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.39l)$$

PROBLEMA IV:

$$\nabla \cdot \mathbf{D}_{\delta\sigma} = \mathbf{0}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.40a)$$

$$-\frac{\rho_\delta}{\mu_\delta^2} \nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma \cdot \mathbf{D}_{\delta\sigma}^T \cdot \nabla \mathbf{D}_{\delta\sigma} = -\nabla \mathbf{d}_{\delta\sigma} + \nabla^2 \mathbf{D}_{\delta\sigma}, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta \quad (8.40b)$$

$$\mathbf{v}_\sigma = -\frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} - \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\sigma}, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.40c)$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{I} - \mathbf{n}_{\delta\sigma} \mathbf{n}_{\delta\sigma}) \cdot \left[ \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \left( \frac{\rho_\delta}{\mu} \nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma \cdot \mathbf{D}_{\delta\sigma}^T \mathbf{D}_{\delta\sigma} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\delta\sigma} + (\nabla \mathbf{D}_{\delta\sigma})^{T1}] \right) \right] \\ &= -\frac{\alpha_\sigma}{\sqrt{\|\mathbf{H}_\sigma\|}} \left( \mathbf{D}_{\delta\sigma} + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} + \frac{\mathbf{H}_\sigma}{\mu} \cdot \nabla \mathbf{d}_{\sigma\sigma} \right), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \end{aligned} \quad (8.40d)$$

$$\mathbf{D}_{\gamma\sigma} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\gamma\sigma} \quad (8.40e)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\eta\sigma} \mathbf{I} + \mu [\nabla \mathbf{D}_{\eta\sigma} + (\nabla \mathbf{D}_{\eta\sigma})^{T1}]) \\ &= \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (-\mathbf{d}_{\gamma\sigma} \mathbf{I} + \mu_\gamma [\nabla \mathbf{D}_{\gamma\sigma} + (\nabla \mathbf{D}_{\gamma\sigma})^{T1}]), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \end{aligned} \quad (8.40f)$$

$$\mathbf{D}_{\eta\sigma} = \mathbf{D}_{\gamma\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.40g)$$

$$\mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\delta\sigma} = \mathbf{n}_{\delta\sigma} \cdot \mathbf{D}_{\sigma\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\delta\sigma}, \quad \delta = \eta, \beta \quad (8.40h)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\sigma}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \mathbf{D}_{\delta\sigma}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \eta, \gamma, \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.40i)$$

$$\mathbf{D}_{\delta\sigma}(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_3) = \mathbf{D}_{\delta\sigma}(\mathbf{r}_\delta), \quad \delta = \beta, \sigma \quad (8.40j)$$

$$\langle \mathbf{d}_{\delta\sigma} \rangle^\delta = \mathbf{0}, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.40k)$$

El modelo macroscópico para la velocidad resulta de aplicar el operador de promedio superficial a la solución para la velocidad en cada uno de los dominios:

$$\langle \mathbf{v}_\delta \rangle_\delta = -\frac{\mathbf{H}_{\delta\eta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\eta \rangle^\eta - \frac{\mathbf{H}_{\delta\gamma}}{\mu_\gamma} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\gamma \rangle^\gamma - \frac{\mathbf{H}_{\delta\beta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\beta \rangle^\beta - \frac{\mathbf{H}_{\delta\sigma}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_\sigma \rangle^\sigma, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.41)$$

donde los tensores de permeabilidad relativa se definen como:

$$\mathbf{H}_{\delta\eta} = \langle \mathbf{D}_{\delta\eta} \rangle_\eta, \quad \mathbf{H}_{\delta\gamma} = \langle \mathbf{D}_{\delta\gamma} \rangle_\gamma, \quad \mathbf{H}_{\delta\beta} = \langle \mathbf{D}_{\delta\beta} \rangle_\beta, \quad \mathbf{H}_{\delta\sigma} = \langle \mathbf{D}_{\delta\sigma} \rangle_\sigma, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.42)$$

Considerando a la definición del promedio superficial, y suponiendo equilibrio local mecánico para la presión dinámica, donde  $\langle \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta = \langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma = \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta = \langle \mathbf{v}_\sigma \rangle^\sigma$  representa una aproximación

razonable, las ecuaciones (8.41) pueden ser reescritas de la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{H}_{\delta\eta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle - \frac{\mathbf{H}_{\delta\gamma}}{\mu_\gamma} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle - \frac{\mathbf{H}_{\delta\beta}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle - \frac{\mathbf{H}_{\delta\sigma}}{\mu} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle, \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.43)$$

donde  $\langle \mathbf{v} \rangle$  es la velocidad promediada espacialmente y  $\langle \mathcal{P} \rangle$  la presión dinámica promedio ponderada en el equilibrio.

El término de *equilibrio local mecánico* se refiere, a diferencia del *equilibrio termodinámico*, a la igualdad de presiones dinámicas promedio entre las diferentes fases o regiones, pero no implica en ningún momento la ausencia de cambio, ni espacial ni temporal.

Sumando a las cuatro ecuaciones que componen el sistema anterior se resumen el modelo de transporte de cantidad de movimiento para este medio efectivo a la siguiente expresión, la cual conserva la estructura de la ley de Darcy:

**Modelo 8.1.2 — Modelo macroscópico de cantidad de movimiento.**

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{H}}{\mu_{prom}} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle \quad (8.44)$$

donde

$$\frac{\mathbf{H}}{\mu_{prom}} = \sum_{\delta=1}^{\delta=4} \left( \frac{\mathbf{H}_{\delta\eta}}{\mu} + \frac{\mathbf{H}_{\delta\gamma}}{\mu_\gamma} + \frac{\mathbf{H}_{\delta\beta}}{\mu} + \frac{\mathbf{H}_{\delta\sigma}}{\mu} \right), \quad \delta = \eta, \gamma, \beta, \sigma \quad (8.45)$$

donde  $\delta = 1$  se refiere a la región  $\eta$ ,  $\delta = 2$  a la fase  $\gamma$ ,  $\delta = 3$  a la fase  $\beta$  y  $\delta = 4$  a la región  $\sigma$ . Además,  $\mathbf{H}$  puede interpretarse como el coeficiente de permeabilidad aparente y  $\mu_{prom}$  como la viscosidad promedio en el casete de ultrafiltración.

La ecuación anterior corresponde al modelo promedio para el transporte de cantidad de movimiento en el casete de ultrafiltración. Con esto concluye esta sección, y se abre paso al promediado del transporte de masa de la especie A.

## 8.2 Ecuaciones que gobiernan el transporte de masa de la especie A

A fin de obtener ecuaciones que describan el transporte de masa de la especie A en todo el casete de ultrafiltración, se requiere partir de las ecuaciones para cada una de las regiones y fases

que lo componen. Es necesario llevar a cabo un proceso de promediado de dichas ecuaciones, a modo de expresarlas en términos de variables que sea válidas en todo el medio efectivo. A esto se le denomina suavizado espacial. Posteriormente estas ecuaciones promedio son escaladas, tomando como base una celda unitaria periódica. Este segundo proceso requiere del uso de suposiciones para poder simplificar al modelo resultante, de esta forma sólo la información con mayor aporte al modelo macroscópico será conservada. A continuación se llevan a cabo estos dos procesos, comenzando con ecuaciones para el nivel de escala II, de acuerdo con la Figura 6.9.

### 8.2.1 Ecuaciones gobernantes a nivel de escala II

En la región- $\sigma$  el transporte de masa se da por difusión y convección pasiva, pero no existen reacciones químicas de la especie A. Las ecuaciones que describen el transporte en regiones con dichas características ya se encuentran reportadas. En este trabajo se adopta la ecuación de medio efectivo para dispersión de un soluto en medios porosos rígidos y homogéneos, deducida por Whitaker (1999). Esta expresión se obtuvo a través del método de promedio volumétrico e implica restricciones de escala y suposiciones típicas de esta técnica de escalamiento. Se supusieron heterogeneidades locales sin efecto significativo sobre el gradiente de velocidad, y un medio poroso espacialmente periódico con flujo uniforme para la solución de los problemas de cerradura asociados. Además, la porosidad de la fibra hueca se consideró constante. A continuación se presenta la ecuación resultante:

$$\frac{\partial c_{A\sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}), \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.46)$$

donde  $c_{A\sigma}$  es la concentración promedio intrínseca de la especie A en la región- $\sigma$  y  $\mathbf{D}^*$  es el tensor de dispersión total que puede ser calculado a través de la solución del problema de cerradura asociado (Whitaker, 1999).

En la región- $\eta$  no existen reacciones químicas de la especie A, por lo cual la ecuación que describe el transporte de masa está dada por:

$$\frac{\partial c_{A\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla c_{A\eta}), \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.47)$$

donde  $\mathcal{D}_{A\eta}$  se define como el coeficiente de difusividad molecular de la especie A en la región- $\eta$ .

En el permeado no tienen lugar reacciones químicas de la especie A, por lo cual la ecuación que describe el transporte de masa en la fase- $\beta$  está dada por:

$$\frac{\partial c_{A\beta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}), \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.48)$$

donde  $c_{A\beta}$  es la concentración de la especie A en la fase- $\beta$ .

A continuación se describen las condiciones de frontera entre la región- $\sigma$  y las fases o regiones con las que está en contacto. En la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\sigma$ , se supone que el transporte perpendicular a la frontera es mucho mayor que las contribuciones por acumulación y transporte superficiales, y tomando en cuenta que las fibras huecas no sufren cambios en su superficie, se obtiene la siguiente ecuación de continuidad del flux, donde se desprecia la velocidad de la frontera con respecto a la velocidad de transporte de la especie A:

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta} = \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.49)$$

donde  $\mathbf{v}_{A\eta}$  es la velocidad de la especie A en la región- $\eta$  y  $\mathbf{v}_{A\sigma}$  la velocidad de la especie A en la región- $\sigma$ , ambas evaluadas en la frontera  $\mathcal{A}_{\eta\sigma}$ .

De forma similar, en la frontera entre la región- $\sigma$  y la fase- $\beta$  se tiene la siguiente condición de frontera de continuidad del flux:

$$\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma} = \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{A\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \quad (8.50)$$

donde  $c_{A\beta}$  es la concentración de la especie A en la fase- $\beta$  y  $\mathbf{v}_{A\beta}$  es la velocidad de la especie A en la fase- $\beta$ , evaluada en la frontera  $\mathcal{A}_{\sigma\beta}$

Finalmente, se establece que no existe transferencia de masa entre esta región y la fase- $\gamma$  mediante la siguiente expresión:

$$\mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma} = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\gamma} \quad (8.51)$$

En la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\sigma$ , se cumple la ecuación de continuidad del flux presentada arriba, y además se consideran resistencias a la transferencia de masa, dadas por la

ecuación:

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta} = k^\sigma (c_{A\eta} - c_{A\sigma}), \quad \text{en la inter-región } \eta\sigma \quad (8.52)$$

donde  $k^\sigma$  es el coeficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\sigma$ .

Entre la región- $\eta$  y la fase- $\gamma$  no existe transporte de masa de la especie A, lo cual se expresa en la siguiente ecuación:

$$\mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta} = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\gamma} \quad (8.53)$$

Además de la condición de frontera de continuidad del flux, existen resistencias a la transferencia de masa en la fase- $\beta$  y la superficie porosa de las fibras huecas, por lo tanto se tiene la siguiente condición de frontera:

$$-\mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot c_{A\beta} \mathbf{v}_{A\beta} = k^\beta (c_{A\sigma} - c_{A\beta}), \quad \text{en la inter-región } \sigma\beta \quad (8.54)$$

donde  $k^\beta$  es el coeficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre las regiones  $\sigma$  y  $\beta$ .

### 8.2.2 Suavizado espacial

#### Región- $\sigma$

Para comenzar con el promediado de las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa de la especie A, se aplica el operador de promediado intrínseco a la ecuación (8.46), obteniéndose la siguiente expresión:

$$\left\langle \frac{\partial c_{A\sigma}}{\partial t} \right\rangle^\sigma + \langle \nabla \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) \rangle^\sigma = \langle \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) \rangle^\sigma \quad (8.55)$$

El promedio intrínseco se supone constante en el tiempo, en cada punto de la derivación, por lo tanto la ecuación anterior puede ser expresada como sigue:

$$\frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \langle \nabla \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) \rangle^\sigma = \langle \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) \rangle^\sigma \quad (8.56)$$

Aplicando ahora el teorema de promediado espacial (ver ecuación (6.6)) en los términos convectivo y dispersivo, es posible reescribir la expresión anterior de la siguiente manera, donde se despreciaron los cambios espaciales del tensor de dispersión  $\mathbf{D}^*$ :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\gamma}} \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \langle \nabla c_{A\sigma} \rangle^\sigma) + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\gamma}} \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA
\end{aligned} \tag{8.57}$$

Con el fin de continuar con los desarrollos, se aplica nuevamente el teorema de promediado espacial en el primer término dispersivo en el lado derecho de la ecuación anterior, así se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\gamma}} \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) dA = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma c_{A\sigma} dA \right) \right] \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\gamma}} \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla c_{A\sigma}) dA
\end{aligned} \tag{8.58}$$

donde  $\mathcal{A}_\sigma$  representa a la suma de las superficies  $\mathcal{A}_{\sigma\eta}$ ,  $\mathcal{A}_{\sigma\beta}$  y  $\mathcal{A}_{\sigma\gamma}$ .

Debido a que están presentes términos de flux dispersivo y flux convectivo, se pueden juntar las integrales correspondientes de cada superficie en una sola integral para el flux total de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma}) dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma}) dA \\
& + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\gamma}} \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot (c_{A\sigma} \mathbf{v}_{A\sigma}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma c_{A\sigma} dA \right) \right]
\end{aligned} \tag{8.59}$$

A partir de la expresión previa y sustituyendo todas las condiciones de frontera dadas por las ecuaciones (8.49), (8.50), (8.51), (8.52) y (8.54) se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma - \frac{k^\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (c_{A\eta} - c_{A\sigma}) dA + \frac{k^\beta}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (c_{A\sigma} - c_{A\beta}) dA \\
& = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_\sigma c_{A\sigma} dA \right) \right]
\end{aligned} \tag{8.60}$$

donde los coeficientes de transporte interfacial se supusieron constantes.

Debido a que la ecuación anterior aún contiene términos integrales (o filtros) donde está presente la concentración microscópica de la especie, se recurre a la descomposición espacial de Gray (1975), reemplazando a la concentración puntual por su promedio y desviaciones:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma - \frac{k^\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) dA \\
& - \frac{k^\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA + \frac{k^\beta}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) dA + \frac{k^\beta}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA \\
& = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\eta} \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma dA + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right]
\end{aligned} \tag{8.61}$$

Con base en la separación de longitudes de escala, las concentraciones promedio pueden suponerse constantes en los dominios de integración. Además, considerando que el sistema se supone espacialmente homogéneo, se deduce el siguiente resultado a partir del teorema de promediado espacial:

$$\frac{\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\eta} dA = -\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \nabla \ln(\varepsilon_\sigma) = \mathbf{0} \tag{8.62}$$

Tomando en consideración el resultado anterior y que  $V_\sigma = \varepsilon_\sigma V$ , y tomando en cuenta a las siguientes definiciones para el área por unidad de volumen:

$$a_{\sigma\eta} = \frac{A_{\sigma\eta}}{V} \tag{8.63a}$$

$$a_{\sigma\beta} = \frac{A_{\sigma\beta}}{V} \tag{8.63b}$$

la ecuación (8.61) puede expresarse como:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma - k^\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\
& - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA + k^\beta \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA \\
& = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] \tag{8.64}
\end{aligned}$$

El modelo anterior no está cerrado, debido a que en este punto de los desarrollos no se conocen a las desviaciones espaciales de la concentración. Por ello, es necesario plantear y resolver las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera que gobiernan las desviaciones de la concentración. A este proceso se le conoce como *cerradura* y no es pertinente llevarlo a cabo en este punto de los desarrollos, ya que las desviaciones espaciales en esta región están acopladas con las de las otras fases y regiones. Por ello, es más conveniente desarrollar en los párrafos siguientes los modelos no cerrados de la región- $\eta$  y la fase- $\beta$ .

### Región- $\eta$

Para llevar a cabo el escalamiento del transporte de masa en esta región, se comienza con la aplicación del operador de promediado a la ecuación (8.47), seguido del uso del teorema de promediado espacial. Al igual que en los desarrollos anteriores, se supone que la región de integración ( $V_\eta$ ) es constante en el tiempo. Además, el coeficiente de difusividad  $\mathcal{D}_{A\eta}$  se considera constante dentro del operador de promediado espacial. Con base en lo anterior, se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta) dA + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta) dA \\
& = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta c_{A\eta} dA \right) \right] + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla c_{A\eta}) dA \\
& + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla c_{A\eta}) dA \tag{8.65}
\end{aligned}$$

donde  $\mathcal{A}_\eta$  representa a la suma de  $\mathcal{A}_{\eta\sigma}$  y  $\mathcal{A}_{\eta\gamma}$ .

Agrupando ahora a los términos convectivo y difusivo para cada frontera de la región- $\eta$  se

puede reescribir la expresión anterior en términos del flux total de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta}) dA + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\gamma}} \mathbf{n}_{\eta\gamma} \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta}) dA \\ &= \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta c_{A\eta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.66)$$

Sustituyendo las condiciones de frontera dadas en las ecuaciones (8.49) y (8.53), la ecuación anterior puede reescribirse como sigue, donde  $k^\sigma$  se supone constante:

$$\frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + \frac{k^\sigma}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (c_{A\eta} - c_{A\sigma}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta c_{A\eta} dA \right) \right] \quad (8.67)$$

A continuación se utiliza la descomposición espacial de Gray (1975) en las integrales interfaciales. Además, considerando que  $V_\eta = \varepsilon_\eta V$  al suponer un sistema espacialmente homogéneo, y utilizando la definición para el área interfacial por unidad de volumen dada en la ecuación (8.63a), se puede expresar la ecuación (8.67) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta \langle \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta) + \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + k^\sigma \varepsilon_\eta^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ &+ \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\eta A_{\eta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \tilde{c}_{A\eta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.68)$$

Esta ecuación es el modelo no cerrado para la concentración de la especie A en la región- $\eta$ . Con lo cual se procede al promediado de la ecuación que gobierna a la fase- $\beta$ , la cual describe la transferencia de masa en el permeado de las fibras huecas.

### Fase- $\beta$

Para llevar a cabo el escalamiento de la ecuación para esta fase, se procede de forma similar a los desarrollos anteriores. De esta forma, y a partir de la ecuación (8.48), se aplica el operador de promedio superficial, junto con el teorema de promediado espacial y tomando en cuenta las mismas suposiciones que para los otros dominios, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta) dA \\
&= \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\beta} \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} c_{A\beta} dA \right) \right] + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla c_{A\beta}) dA \quad (8.69)
\end{aligned}$$

Agrupando los términos convectivo y difusivo para la frontera  $\beta - \sigma$  se pueden expresar en términos del flux total. Este flux total puede ser utilizado para sustituir a la condición de frontera dada en la ecuación (8.50), la cual define una resistencia a la transferencia de masa. Considerando lo anterior y suponiendo a  $k^\beta$  constante se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \langle c_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta - \frac{k^\beta}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (c_{A\sigma} - c_{A\beta}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\beta} \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} c_{A\beta} dA \right) \right] \quad (8.70)$$

Recurriendo a la descomposición espacial de Gray (1975), suponiendo que las variables promedio son constantes dentro de los dominios de integración y que el medio es espacialmente homogéneo, y sustituyendo a la definición del área interfacial por unidad de volumen (ver ecuación (8.63b)), la ecuación anterior puede ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \right) + \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta - k^\beta \varepsilon_\beta^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) \\
& - \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\beta A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\beta} \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta + \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right) \right] \quad (8.71)
\end{aligned}$$

Una vez que se cuenta con los modelos no cerrados para los tres dominios involucrados en este sistema, se procede a plantear y resolver las ecuaciones diferenciales y condiciones de frontera que gobiernan a las desviaciones espaciales de la concentración en las diferentes fases y regiones.

### 8.2.3 Deducción del problema de las desviaciones

#### Región- $\sigma$

Para obtener la ecuación de las desviaciones espaciales de la concentración en esta región, se resta el modelo no cerrado (ecuación (8.64)) a la ecuación correspondiente de la microescala

(ecuación (8.46)), y considerando la siguiente identidad:

$$c_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma = \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \tilde{\mathbf{v}}^\sigma + \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \quad (8.72)$$

la ecuación que gobierna a las desviaciones en la región- $\sigma$  está dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \tilde{c}_{A\sigma}}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \tilde{\mathbf{v}}^\sigma + \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) - \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma + k^\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & + \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA - k^\beta \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) - \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA \\ & = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \tilde{c}_{A\sigma} - \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.73)$$

Esta ecuación puede ser simplificada a través de restricciones de escala y tiempo mediante un análisis de orden de magnitud de los términos homogéneos. A continuación se desarrolla este análisis, comenzando con los siguientes estimados de orden de magnitud:

$$\frac{\partial \tilde{c}_{A\sigma}}{\partial t} = \mathbf{O} \left( \frac{\tilde{c}_{A\sigma}}{t^*} \right) \quad (8.74a)$$

$$\nabla \cdot (\tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma) = \mathbf{O} \left( \frac{\tilde{c}_{A\sigma} \langle v^\sigma \rangle^\sigma}{\ell_\sigma} \right) \quad (8.74b)$$

$$\nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma = \mathbf{O} \left( \frac{\tilde{c}_{A\sigma} \langle v^\sigma \rangle^\sigma}{L} \right) \quad (8.74c)$$

$$\frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA = \mathbf{O} \left( \frac{k^\sigma (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma})}{\ell_\sigma} \right) \quad (8.74d)$$

$$\frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA = \mathbf{O} \left( \frac{k^\beta (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta})}{\ell_\sigma} \right) \quad (8.74e)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_{A\beta} \tilde{c}_{A\sigma}}{\ell_\sigma^2} \right) \quad (8.74f)$$

$$\nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \frac{1}{V_\sigma} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] = \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_{A\beta} \tilde{c}_{A\sigma}}{\ell_\sigma L} \right) \quad (8.74g)$$

donde  $\ell_\sigma$  es la longitud característica de la región- $\sigma$ . Debido a que  $\ell_\sigma \ll L$ , se deduce lo siguiente:

$$\mathbf{O} \left( \frac{\tilde{c}_{A\sigma} \langle v^\sigma \rangle^\sigma}{L} \right) \ll \mathbf{O} \left( \frac{\tilde{c}_{A\sigma} \langle v^\sigma \rangle^\sigma}{\ell_\sigma} \right) \quad (8.75a)$$

$$\mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_{A\beta} \tilde{c}_{A\sigma}}{\ell_\sigma L} \right) \ll \mathbf{O} \left( \frac{\mathcal{D}_{A\beta} \tilde{c}_{A\sigma}}{\ell_\sigma^2} \right) \quad (8.75b)$$

Esto justifica despreciar a los términos no locales para el término convectivo y el de dispersión con respecto a sus contrapartes locales.

Ahora es importante conocer las condiciones bajo las cuales el término de acumulación puede ser despreciado con respecto al resto de los términos homogéneos que no fueron despreciados. Para esto, se definen los siguientes números adimensionales:

$$Bi_{\sigma\eta} = \frac{k^\sigma \ell_\sigma}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (8.76a)$$

$$Bi_{\sigma\beta} = \frac{k^\beta \ell_\sigma}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (8.76b)$$

$$Pe_\sigma = \frac{\langle v^\sigma \rangle^\sigma \ell_\sigma}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (8.76c)$$

donde  $Bi_{\sigma\eta}$  es el número de Biot en la frontera entre las regiones  $\sigma$  y  $\eta$ ,  $Bi_{\sigma\beta}$  el número de Biot entre la región- $\sigma$  y la fase- $\beta$ , y  $Pe_\sigma$  el número de Péclet en la región- $\sigma$ . Utilizando a las definiciones anteriores, se deduce la siguiente restricción de escala temporal:

$$\mathbf{O} \left( \frac{\ell_\sigma^2}{\mathcal{D}_{A\beta} \left( 1 + Pe_\sigma + \frac{Bi_{\sigma\eta}(\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma})}{\tilde{c}_{A\sigma}} + \frac{Bi_{\sigma\beta}(\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta})}{\tilde{c}_{A\sigma}} \right)} \right) \ll t^* \quad (8.77)$$

A través del análisis anterior y tomando en cuenta la naturaleza solenoidal de  $\mathbf{v}^\sigma$  y sus desviaciones espaciales, la ecuación (8.73) se reduce a:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{v}}^\sigma \cdot \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \mathbf{v}^\sigma \cdot \nabla \tilde{c}_{A\sigma} &= \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) - k^\sigma \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ &- \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA + k^\beta \varepsilon_\sigma^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA \end{aligned} \quad (8.78)$$

Para continuar a la solución del problema de las desviaciones, es necesario llevar a cabo desarrollos similares en la región- $\eta$  y en la fase- $\beta$ , los cuales se detallan a continuación.

### Región- $\eta$

Restando el modelo no cerrado para esta región, dado en la ecuación (8.68), a la ecuación de la concentración puntual, dada por la ecuación (8.47), se obtiene la ecuación que gobierna a las

desviaciones de la concentración en la región- $\eta$ :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \tilde{c}_{A\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta \tilde{\mathbf{v}}_\eta + \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta) - \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta - k^\sigma \varepsilon_\eta^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\eta A_{\eta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \tilde{c}_{A\eta} - \frac{1}{V_\eta} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \tilde{c}_{A\eta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.79)$$

De forma similar que para la región- $\sigma$ , conviene ahora realizar un análisis de orden de magnitud para conocer cuáles términos aportan poco a la ecuación anterior. A través de este análisis, que es idéntico al presentado arriba, se determina que los términos no locales para la convección y difusión pueden ser despreciados con respecto a los respectivos términos locales, debido a la siguiente restricción de escala:

$$\ell_\eta \ll L \quad (8.80)$$

donde  $\ell_\eta$  es la máxima de las longitudes características de la región- $\eta$ .

Así también, es posible despreciar al término de acumulación cuando el tiempo característico cumple con la siguiente restricción:

$$\mathbf{O} \left( \frac{\ell_\eta^2}{\mathcal{D}_{A\eta} \left( 1 + Pe_\eta + \frac{Bi_{\eta\sigma} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma})}{\tilde{c}_{A\eta}} \right)} \right) \ll t^* \quad (8.81)$$

Se concluye que la ecuación que describe a las desviaciones en la región- $\eta$ , una vez tomada en cuenta la naturaleza solenoidal de  $\mathbf{v}_\eta$  y sus desviaciones, es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \tilde{\mathbf{v}}_\eta \cdot (\nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta) + \mathbf{v}_\eta \cdot (\nabla \tilde{c}_{A\eta}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta}) + k^\sigma \varepsilon_\eta^{-1} a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & + \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\eta A_{\eta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA, \quad \text{en la región-}\eta \end{aligned} \quad (8.82)$$

### Fase- $\beta$

Con el fin de obtener a la ecuación que gobierna a las desviaciones de la concentración en esta fase, se resta el modelo no cerrado dado en la ecuación (8.71) a la ecuación puntual dada por la

ecuación (8.48) para obtener:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \tilde{c}_{AB}}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_{AB} \rangle^\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta + \tilde{c}_{AB} \mathbf{v}_\beta) - \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{AB} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + k^\beta \varepsilon_\beta^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{AB} \rangle^\beta) \\ & + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\beta A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{AB}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{AB} \left( \nabla \tilde{c}_{AB} - \frac{1}{V_\beta} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{AB} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.83)$$

Siguiendo un procedimiento similar al presentado para las regiones  $\sigma$  y  $\eta$ , la ecuación anterior se reduce a:

$$\begin{aligned} & \tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot (\nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta) + \mathbf{v}_\beta \cdot (\nabla \tilde{c}_{AB}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{AB} \nabla \tilde{c}_{AB}) - k^\beta \varepsilon_\beta^{-1} a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{AB} \rangle^\beta) \\ & - \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\beta A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{AB}) dA, \quad \text{en la fase-}\beta \end{aligned} \quad (8.84)$$

esto implica aceptar las restricciones de escala espacial y temporal:

$$\ell_\beta \ll L \quad (8.85a)$$

$$\mathcal{O} \left( \frac{\ell_\beta^2}{\mathcal{D}_{AB} \left( 1 + Pe_\beta + \frac{Bi_{\beta\sigma} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{AB})}{\tilde{c}_{AB}} \right)} \right) \ll t^* \quad (8.85b)$$

donde  $\ell_\beta$  es la longitud característica de la fase- $\beta$ .

Con esto concluye la deducción de las ecuaciones que gobiernan a las desviaciones espaciales en los tres dominios. Es necesario deducir ahora las condiciones de frontera para las desviaciones de la concentración de la especie A, para esto se aplica la descomposición espacial de Gray (1975) a las ecuaciones (8.49), (8.52), (8.50) y (8.54) dando lugar a las expresiones:

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \langle c_{A\eta} \rangle^\eta \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta} = \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \mathbf{v}^\sigma \\ & - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (8.86a)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \langle c_{A\eta} \rangle^\eta \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta} = \\ & k^\sigma (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) + k^\sigma (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (8.86b)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma} = \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \langle c_{AB} \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta \\ & - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{AB} \nabla \langle c_{AB} \rangle^\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \tilde{c}_{AB} \mathbf{v}_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{AB} \nabla \tilde{c}_{AB}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \end{aligned} \quad (8.86c)$$

$$\begin{aligned}
& -\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \tilde{c}_{A\beta} = \\
& k^\beta (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) + k^\beta (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta}
\end{aligned} \tag{8.86d}$$

Debido a que este problema de cerradura se plantea para una celda unitaria periódica, se imponen las siguientes condiciones de periodicidad:

$$\tilde{c}_{A\sigma}(\mathbf{r}_\sigma + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_{A\sigma}(\mathbf{r}_\sigma), \quad i = 1, 2, 3 \tag{8.87a}$$

$$\tilde{c}_{A\eta}(\mathbf{r}_\eta + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_{A\eta}(\mathbf{r}_\eta), \quad i = 1, 2, 3 \tag{8.87b}$$

$$\tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{l}_3) = \tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r}_\beta) \tag{8.87c}$$

Además, los campos de las desviaciones están acotados de acuerdo con las siguientes restricciones integrales:

$$\langle \tilde{c}_{A\sigma} \rangle^\sigma = 0 \quad \langle \tilde{c}_{A\eta} \rangle^\eta = 0 \quad \langle \tilde{c}_{A\beta} \rangle^\beta = 0 \tag{8.88}$$

Tomando en cuenta a las tres ecuaciones para las desviaciones, y a las cuatro condiciones de frontera interfaciales, se identifican las fuentes:  $\nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma$ ,  $\nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta$ ,  $\nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ ,  $\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma$ ,  $\langle c_{A\eta} \rangle^\eta$  y  $\langle c_{A\beta} \rangle^\beta$ . Esto significa que se tendrían que escribir soluciones formales en términos de estas fuentes usando seis variables de cerradura para las desviaciones en cada fase, lo cual da un total de 18 incógnitas. Para reducir el número de fuentes, se propone como primera aproximación adoptar la suposición de equilibrio local másico. Bajo esta suposición, la concentración promedio en la región- $\eta$  es igual a la concentración promedio intrínseca en la región- $\sigma$  y la fase- $\beta$ . Esta suposición se ha usado antes en el estudio de sistemas biológicos como las biopelículas (Wood y Whitaker, 2000). La característica principal del equilibrio local másico es que la siguiente igualdad representa una aproximación razonable:

$$\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma = \langle c_{A\eta} \rangle^\eta = \langle c_{A\beta} \rangle^\beta = \langle c_A \rangle \tag{8.89}$$

Con base en esta suposición, el problema de las desviaciones se reduce a:

$$\tilde{\mathbf{v}}^\sigma \cdot \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{v}^\sigma \cdot (\nabla \tilde{c}_{A\sigma}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \tilde{c}_{A\sigma}) - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA$$

$$+ \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.90a)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\eta \cdot \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{v}_\eta \cdot (\nabla \tilde{c}_{A\eta}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta}) + \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\eta A_{\eta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.90b)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta \cdot \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{v}_\beta \cdot (\nabla \tilde{c}_{A\beta}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\beta} \nabla \tilde{c}_{A\beta}) - \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\beta A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA, \quad \text{en la fase-}\beta \quad (8.90c)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \langle c_A \rangle \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta} = \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \langle c_A \rangle \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.90d)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot (\langle c_A \rangle \mathbf{v}_\eta - \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_A \rangle + \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta - \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \tilde{c}_{A\eta}) = k^\sigma (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.90e)$$

$$\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \langle c_A \rangle \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \tilde{c}_{A\sigma} = \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \langle c_A \rangle \mathbf{v}_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \langle c_A \rangle + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \tilde{c}_{A\beta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \quad (8.90f)$$

$$- \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot (\langle c_A \rangle \mathbf{v}_\beta + \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \langle c_A \rangle - \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta + \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \tilde{c}_{A\beta}) = k^\beta (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \quad (8.90g)$$

$$\tilde{c}_{A\sigma}(\mathbf{r}_\sigma + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_{A\sigma}(\mathbf{r}_\sigma), \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.90h)$$

$$\tilde{c}_{A\eta}(\mathbf{r}_\eta + \mathbf{l}_i) = \tilde{c}_{A\eta}(\mathbf{r}_\eta), \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.90i)$$

$$\tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{l}_3) = \tilde{c}_{A\beta}(\mathbf{r}_\beta) \quad (8.90j)$$

$$\langle \tilde{c}_{A\sigma} \rangle^\sigma = 0, \quad \langle \tilde{c}_{A\eta} \rangle^\eta = 0, \quad \langle \tilde{c}_{A\beta} \rangle^\beta = 0 \quad (8.90k)$$

En este nuevo planteamiento, únicamente se identifican dos fuentes:  $\nabla \langle c_A \rangle$  y  $\langle c_A \rangle$ . Con estas fuentes se proponen las siguientes soluciones formales:

$$\tilde{c}_{A\sigma} = \mathbf{b}_\sigma \cdot \nabla \langle c_A \rangle + s_\sigma \langle c_A \rangle \quad (8.91a)$$

$$\tilde{c}_{A\eta} = \mathbf{b}_\eta \cdot \nabla \langle c_A \rangle + s_\eta \langle c_A \rangle \quad (8.91b)$$

$$\tilde{c}_{A\beta} = \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \langle c_A \rangle + s_\beta \langle c_A \rangle \quad (8.91c)$$

Esta solución formal es significativamente más sencilla que la solución que hubiese sido formulada a partir de las seis fuentes originales. Sin embargo, esta simplificación conlleva un mayor número de suposiciones, las cuales son adicionales a las suposiciones espaciales y temporales típicas. A pesar de esto, es conveniente continuar con este desarrollo, a fin de obtener una primera aproximación para la deducción de un modelo de transporte de masa para el casete de ultrafiltración.

En caso de no resultar, de acuerdo con la simulación numérica, en un modelo adecuado para representar al sistema en cuestión, sería necesario retomar el problema original de las seis fuentes.

### 8.2.4 Problemas de cerradura

Sustituyendo las soluciones formales en el problema para las desviaciones, se obtienen los siguientes problemas de cerradura:

#### PROBLEMA I

$$\tilde{\mathbf{v}}^\sigma + \mathbf{v}^\sigma \cdot (\nabla \mathbf{b}_\sigma) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \mathbf{b}_\sigma) - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\mathbf{b}_\eta - \mathbf{b}_\sigma) dA + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\mathbf{b}_\sigma - \mathbf{b}_\beta) dA, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.92a)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\delta + \mathbf{v}_\delta \cdot (\nabla \mathbf{b}_\delta) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\delta} \nabla \mathbf{b}_\delta) + \frac{k^\Gamma a_{\sigma\delta}}{\varepsilon_\delta A_{\delta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\delta\sigma}} (\mathbf{b}_\delta - \mathbf{b}_\sigma) dA, \quad \text{en la región- } \delta, \quad \delta = \eta, \beta, \quad \Gamma = \sigma, \beta \quad (8.92b)$$

$$\begin{aligned} & -\mathbf{n}_{\eta\sigma} \mathcal{D}_{A\eta} + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta \mathbf{b}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \mathbf{b}_\eta \\ & = -\mathbf{n}_{\eta\sigma} \mathcal{D}_{A\sigma} + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}^\sigma \mathbf{b}_\sigma - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \mathbf{b}_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (8.92c)$$

$$-\mathbf{n}_{\eta\sigma} \mathcal{D}_{A\eta} + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta \mathbf{b}_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \mathbf{b}_\eta = k^\sigma (\mathbf{b}_\eta - \mathbf{b}_\sigma), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.92d)$$

$$\begin{aligned} & -\mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathcal{D}_{A\sigma} + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}^\sigma \mathbf{b}_\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla \mathbf{b}_\sigma \\ & = -\mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathcal{D}_{A\beta} + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{b}_\beta, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \end{aligned} \quad (8.92e)$$

$$\mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathcal{D}_{A\beta} - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \mathbf{b}_\beta = k^\beta (\mathbf{b}_\sigma - \mathbf{b}_\beta), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \quad (8.92f)$$

$$\mathbf{b}_\delta(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_\delta(\mathbf{r}_\delta), \quad i = 1, 2, 3, \quad \delta = \sigma, \eta \quad (8.92g)$$

$$\mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{l}_3) = \mathbf{b}_\beta(\mathbf{r}_\beta) \quad (8.92h)$$

$$\langle \mathbf{b}_\delta \rangle^\delta = \mathbf{0}, \quad \delta = \sigma, \eta, \beta \quad (8.92i)$$

A través del análisis de las ecuaciones de los dominios, se concluye que los estimados de órdenes de magnitud de las variables de cerradura  $\mathbf{b}_\sigma$ ,  $\mathbf{b}_\eta$  y  $\mathbf{b}_\beta$  son iguales y están dados por:

$$\max(\mathbf{b}_i) = \mathbf{O}(\ell), \quad i = \sigma, \eta, \beta \quad (8.93)$$

donde  $\ell$  es la máxima longitud característica de las fases y regiones al nivel de escala de la celda

periódica unitaria.

### PROBLEMA II

$$\mathbf{v}^\sigma \cdot \nabla s_\sigma = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla s_\sigma) - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (s_\eta - s_\sigma) dA + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{\varepsilon_\sigma A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (s_\sigma - s_\beta) dA, \quad \text{en la región-}\sigma \quad (8.94a)$$

$$\mathbf{v}_\delta \cdot \nabla s_\delta = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\delta} \nabla s_\delta) + \frac{k^\Gamma a_{\sigma\delta}}{\varepsilon_\delta A_{\delta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\delta\sigma}} (s_\delta - s_\sigma) dA, \quad \text{en la región-}\delta, \quad \delta = \eta, \beta, \quad \Gamma = \sigma, \beta \quad (8.94b)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta s_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla s_\eta \\ &= \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}^\sigma + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}^\sigma s_\sigma - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla s_\sigma, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \end{aligned} \quad (8.94c)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta + \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\eta s_\eta - \mathbf{n}_{\eta\sigma} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla s_\eta = k^\sigma (s_\eta - s_\sigma), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\sigma} \quad (8.94d)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}^\sigma + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}^\sigma s_\sigma - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\sigma} \nabla s_\sigma \\ &= \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta s_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla s_\beta, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \end{aligned} \quad (8.94e)$$

$$-\mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta - \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathbf{v}_\beta s_\beta + \mathbf{n}_{\sigma\beta} \cdot \mathcal{D}_{A\beta} \nabla s_\beta = k^\beta (s_\sigma - s_\beta), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\sigma\beta} \quad (8.94f)$$

$$s_\delta(\mathbf{r}_\delta + \mathbf{l}_i) = s_\delta(\mathbf{r}_\delta), \quad i = 1, 2, 3, \quad \delta = \sigma, \eta \quad (8.94g)$$

$$s_\beta(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{l}_3) = s_\beta(\mathbf{r}_\beta), \quad (8.94h)$$

$$\langle s_\delta \rangle^\delta = 0, \quad \delta = \sigma, \eta, \beta \quad (8.94i)$$

Analizando las fuentes de este problema, se deduce que el orden de magnitud máximo para  $s_\sigma$  es 1. Además, dado que al sustituir el orden de magnitud en las máximas magnitudes para  $s_\eta$  y  $s_\beta$ , resulta que todas convergen en 1. Con esto se concluye que:

$$\text{máx}(s_i) = \mathbf{O}(1) \quad i = \sigma, \eta, \beta \quad (8.95)$$

### 8.2.5 Modelo cerrado

Una vez estimado el orden de magnitud de las variables de cerradura, se retoma ahora a las ecuaciones del modelo no cerrado. Al multiplicar la ecuación promedio correspondiente a cada fase o región por su respectiva fracción volumétrica se obtienen las expresiones:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\sigma \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma - k^\sigma a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & - \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{A_{\sigma\eta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\eta}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA + k^\beta a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) + \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{A_{\sigma\beta}} \int_{\mathcal{A}_{\sigma\beta}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA \\ & = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \varepsilon_\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.96a)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\eta \frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \varepsilon_\eta \nabla \cdot (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta \langle \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta) + \varepsilon_\eta \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + k^\sigma a_{\sigma\eta} (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta - \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma) \\ & + \frac{k^\sigma a_{\sigma\eta}}{A_{\eta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\eta\sigma}} (\tilde{c}_{A\eta} - \tilde{c}_{A\sigma}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta \varepsilon_\eta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \tilde{c}_{A\eta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.96b)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\beta \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \nabla \cdot (\langle c_{A\beta} \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \varepsilon_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta - k^\beta a_{\sigma\beta} (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma - \langle c_{A\beta} \rangle^\beta) \\ & - \frac{k^\beta a_{\sigma\beta}}{A_{\beta\sigma}} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} (\tilde{c}_{A\sigma} - \tilde{c}_{A\beta}) dA = \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\beta} \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \varepsilon_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.96c)$$

Sumando las ecuaciones anteriores es posible cancelar los términos asociados con las resistencias a la transferencia de masa en las fronteras. Una vez realizado esto, se da lugar a una única ecuación que describe el transporte de masa de la especie A en el casete de ultrafiltración:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_\sigma \frac{\partial \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma}{\partial t} + \varepsilon_\eta \frac{\partial \langle c_{A\eta} \rangle^\eta}{\partial t} + \varepsilon_\beta \frac{\partial \langle c_{A\beta} \rangle^\beta}{\partial t} + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot (\langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \varepsilon_\eta \nabla \cdot (\langle c_{A\eta} \rangle^\eta \langle \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta) \\ & + \varepsilon_\beta \nabla \cdot (\langle c_{A\beta} \rangle^\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma + \varepsilon_\eta \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta + \varepsilon_\beta \nabla \cdot \langle \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \\ & = \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \nabla \langle c_{A\sigma} \rangle^\sigma \varepsilon_\sigma + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\eta} \left( \nabla \langle c_{A\eta} \rangle^\eta \varepsilon_\eta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \tilde{c}_{A\eta} dA \right) \right] \\ & + \nabla \cdot \left[ \mathcal{D}_{A\beta} \left( \nabla \langle c_{A\beta} \rangle^\beta \varepsilon_\beta + \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right) \right] \end{aligned} \quad (8.97)$$

A continuación se aplica la suposición de equilibrio local másico, de la misma forma que se utilizó para el problema de las desviaciones. Considerando lo anterior, la ecuación (8.97) se reescribe en términos de la concentración local promedio de la especie A,  $\langle c_A \rangle$ , de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
& (\varepsilon_\sigma + \varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta) \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \varepsilon_\eta \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta) + \varepsilon_\beta \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) \\
& + \varepsilon_\sigma \nabla \cdot (\langle \tilde{c}_{A\sigma} \mathbf{v}^\sigma \rangle^\sigma) + \varepsilon_\eta \nabla \cdot (\langle \tilde{c}_{A\eta} \mathbf{v}_\eta \rangle^\eta) + \varepsilon_\beta \nabla \cdot (\langle \tilde{c}_{A\beta} \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) \\
& = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\sigma + \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\eta + \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\beta) \\
& + \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \tilde{c}_{A\sigma} dA \right) + \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \tilde{c}_{A\eta} dA + \frac{\mathcal{D}_{A\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{c}_{A\beta} dA \right] \quad (8.98)
\end{aligned}$$

Cada uno de los filtros presentes en el modelo anterior debe ser sustituido por las soluciones para las variables de las desviaciones deducidas anteriormente. Para ello, se sustituyen las soluciones formales, dadas en las ecuaciones (8.91), en la ecuación anterior, y dan lugar al siguiente resultado después de aplicar la relación de Dupuit-Forchheimer:

$$\begin{aligned}
& (\varepsilon_\sigma + \varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta) \frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle_\sigma) + \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta) + \nabla \cdot (\langle c_A \rangle \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta) \\
& + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^\sigma \mathbf{b}_\sigma \rangle_\sigma \cdot \nabla \langle c_A \rangle) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}^\sigma s_\sigma \rangle_\sigma \langle c_A \rangle) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\eta \mathbf{b}_\eta \rangle_\eta \cdot \nabla \langle c_A \rangle) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\eta s_\eta \rangle_\eta \langle c_A \rangle) \\
& + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle_\beta \cdot \nabla \langle c_A \rangle) + \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta s_\beta \rangle_\beta \langle c_A \rangle) = \nabla \cdot (\mathbf{D}^* \cdot \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\sigma + \mathcal{D}_{A\eta} \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\eta + \mathcal{D}_{A\beta} \nabla \langle c_A \rangle \varepsilon_\beta) \\
& + \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_\sigma \cdot \nabla \langle c_A \rangle dA \right) + \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \mathbf{b}_\eta \cdot \nabla \langle c_A \rangle dA + \frac{\mathcal{D}_{A\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta \cdot \nabla \langle c_A \rangle dA \right] \\
& + \nabla \cdot \left[ \mathbf{D}^* \cdot \left( \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma \langle c_A \rangle dA \right) + \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta s_\eta \langle c_A \rangle dA + \frac{\mathcal{D}_{A\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_\beta \langle c_A \rangle dA \right] \quad (8.99)
\end{aligned}$$

Factorizando a  $\langle c_A \rangle$  y  $\nabla \langle c_A \rangle$  se pueden agrupar términos semejantes, para obtener la forma final para el modelo de medio efectivo para el casete de ultrafiltración. Este modelo ya no distingue entre las dos regiones y la fase presentes en el volumen de promediado, sino que permite representar al casete como un nuevo continuo. La ecuación está dada de la siguiente forma:

**Modelo 8.2.1 — Modelo de medio efectivo para el transporte de masa de la especie A.**

$$\underbrace{\frac{\partial \langle c_A \rangle}{\partial t}}_{\text{Acumulación de masa}} + \underbrace{\nabla \cdot (\langle c_A \rangle \mathbf{v}_{ef})}_{\text{Transporte por convección}} = \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{D}_{ef} \cdot \nabla \langle c_A \rangle)}_{\text{Transporte por dispersión}} \quad (8.100)$$

donde el vector de velocidad efectiva se define como:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_\sigma + \varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta) \mathbf{v}_{ef} &= \langle \mathbf{v}^\sigma \rangle_\sigma + \langle \mathbf{v}_\eta \rangle_\eta + \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_\beta + \langle \mathbf{v}^\sigma s_\sigma \rangle_\sigma + \langle \mathbf{v}_\eta s_\eta \rangle_\eta + \langle \mathbf{v}_\beta s_\beta \rangle_\beta \\ &- \mathbf{D}^* \cdot \left( \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} s_\sigma dA \right) - \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta s_\eta dA - \frac{\mathcal{D}_{A\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_\beta dA \end{aligned} \quad (8.101)$$

y el tensor de dispersión efectiva:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_\sigma + \varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta) \mathbf{D}_{ef} &= \\ \mathbf{D}^* \varepsilon_\sigma + \mathcal{D}_{A\eta} \varepsilon_\eta \mathbf{I} + \mathcal{D}_{A\beta} \varepsilon_\beta \mathbf{I} + \mathbf{D}^* \cdot &\left( \frac{1}{V} \int_{\mathcal{A}_\sigma} \mathbf{n}_{\sigma\beta} \mathbf{b}_\sigma dA \right) + \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{V} \int_{\mathcal{A}_\eta} \mathbf{n}_\eta \mathbf{b}_\eta dA \\ + \frac{\mathcal{D}_{A\beta}}{V} \int_{\mathcal{A}_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_\beta dA - \langle \mathbf{v}^\sigma \mathbf{b}_\sigma \rangle_\sigma - \langle \mathbf{v}_\eta \mathbf{b}_\eta \rangle_\eta - \langle \mathbf{v}_\beta \mathbf{b}_\beta \rangle_\beta \end{aligned} \quad (8.102)$$

Los términos de acumulación, convección y dispersión de masa de la especie A están también presentes en las ecuaciones de la microescala. Por esta razón, la ecuación (8.100) tiene significado físico y estructura matemática predecible. Sin embargo, la ventaja de dicha ecuación con respecto a otras que han sido postuladas, es que la deducción de la misma permite la definición de las ecuaciones (8.101) y (8.102), las cuales no resultan obvias ni predecibles. El vector de velocidad efectiva y el tensor de dispersión efectiva son coeficientes de medio efectivo. Al tratarse de un modelo *a priori*, ambos pueden ser predichos al resolver los dos problemas de cerradura asociados al problema de equilibrio local másico. Dichos problemas de cerradura no se traducen en un ejercicio de computo demandante y presentan la ventaja de poder obtener un valor no arbitrario para el vector de velocidad efectiva y para el tensor de dispersión efectiva. Esta es la principal diferencia con respecto a los modelos *a posteriori*, donde se realiza un ajuste para encontrar el valor de estos coeficientes.

En las ecuaciones (8.101) y (8.102) puede notarse el importante papel de los filtros matemáticos. Los filtros convectivos y dispersivos permiten, a través de las variables de cerradura, identificar y presentar en la ecuación final a aquella información proveniente de la microescala que contribuye macroscópicamente a la convección y dispersión, respectivamente. Respecto al vector de velocidad efectiva, en la ecuación (8.101) se observan del lado derecho de la ecuación, tres términos que corresponden a la velocidad en cada fase o región, seguidos por tres términos provenientes de filtros convectivos, y finalmente tres términos originados a partir de filtros dispersivos. La información proveniente de los filtros sirve de corrección a la suma de las velocidades promedio de las fases y regiones. De forma similar, en la definición para el tensor de dispersión efectiva, ecuación (8.102), está presente el aporte de los filtros. La difusividad efectiva corresponde a una corrección para la dispersión, proporcionada por los filtros difusivos; mientras que la dispersión hidrodinámica realiza correcciones a partir de filtros convectivos.

### 8.3 Resumen de los modelos del tanque de membrana

En el tanque de membrana coexisten dos regiones. La región- $\zeta$  representa al medio efectivo de la membrana de ultrafiltración, mientras que la región- $\eta$  está compuesta por la fase- $\beta$ , sólidos inertes mecánicamente, y contiene a la especie  $A$ . Las ecuaciones que definen a la región- $\zeta$  fueron desarrolladas en las secciones anteriores; sin embargo, para la región- $\eta$  no es necesario llevar a cabo un desarrollo, ya que las ecuaciones microscópicas y macroscópicas conservan la misma estructura, la cual se presenta a continuación en el desglose de las expresiones para ambos dominios.

#### 8.3.1 Transporte de masa total y cantidad de movimiento

Las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa total están dadas por:

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = 0, \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.103a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_\eta = 0, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.103b)$$

Mientras que las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento se definen de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{\mathbf{H}}{\mu_{prom}} \cdot \nabla \langle \mathcal{P} \rangle, \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.104a)$$

$$\rho_{\eta} \mathbf{v}_{\eta} \cdot \nabla \mathbf{v}_{\eta} = -\nabla \mathcal{P}_{\eta} + \mu \nabla^2 \mathbf{v}_{\eta}, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.104b)$$

Además se imponen las siguientes condiciones de frontera:

$$\mathbf{v}_{\eta} = \mathbf{v}_{ef}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.105a)$$

$$\mathbf{v}_{\eta} = \mathbf{v}_{\eta e}, \quad \text{en } \mathcal{A}_e \quad (8.105b)$$

$$\mathbf{v}_{\eta} = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_p \quad (8.105c)$$

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_{atm}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{sup} \quad (8.105d)$$

$$\mathbf{v}_{ef} = \mathbf{v}_{efsup}, \quad \text{en } \mathcal{A}_o \quad (8.105e)$$

De acuerdo con las ecuaciones anteriores, se supone continuidad de la velocidad en la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\zeta$ . En la superficie de entrada del tanque ( $\mathcal{A}_e$ ), se supone conocida la velocidad del fluido en la región- $\eta$  ( $\mathbf{v}_{\eta e}$ ). En la superficie con las paredes del tanque ( $\mathcal{A}_p$ ) la velocidad del fluido en la región- $\eta$  es cero. En contacto con la atmósfera ( $\mathcal{A}_{sup}$ ), la presión corresponde a la atmosférica ( $\mathcal{P}_{atm}$ ). Por último, en la superficie de salida del permeado por el casete de ultrafiltración ( $\mathcal{A}_o$ ) se supone conocida la velocidad efectiva ( $\mathbf{v}_{efsup}$ ).

### 8.3.2 Transporte de masa de la especie A

Las ecuaciones macroscópicas que gobiernan el transporte de masa de la especie A dentro y fuera de los casetes de ultrafiltración son:

$$\frac{\partial c_{A\zeta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\zeta} \mathbf{v}_{ef}) = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{ef} \cdot \nabla c_{A\zeta}), \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.106a)$$

$$\frac{\partial c_{A\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{A\eta} \mathbf{v}_{\eta}) = \nabla \cdot (\mathcal{D}_{A\eta} \nabla c_{A\eta}), \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.106b)$$

Para completar el planteamiento del problema macroscópico del transporte de masa de la especie A, se imponen las siguientes condiciones de frontera e iniciales:

$$\mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\zeta} \mathbf{v}_{A\zeta} = \mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\eta} \mathbf{v}_{A\eta}, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.107a)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\zeta} \mathbf{v}_{A\zeta} = k^{\zeta} (c_{A\eta} - c_{A\zeta}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.107b)$$

$$\mathbf{n}_{\zeta o} \cdot c_{A\zeta} \mathbf{v}_{A\zeta} = k^o (c_{A\zeta} - c_{Ao}), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\zeta o} \quad (8.107c)$$

$$-\mathbf{n}_{\eta p} \cdot \mathcal{D}_{A\eta} \nabla c_{A\eta} = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_p \quad (8.107d)$$

$$\mathbf{n}_{\zeta sup} \cdot c_{A\zeta} \mathbf{v}_{A\zeta} = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{sup} \quad (8.107e)$$

$$c_A^\eta = c_{A\eta e}, \quad \text{en } \mathcal{A}_e \quad (8.107f)$$

$$\text{Cuando } t = 0, \quad c_{A\zeta} = c_{A\zeta 0}, \quad c_{A\eta} = c_{A\eta 0} \quad (8.107g)$$

De acuerdo con estas expresiones, en la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\zeta$  se impuso una condición de frontera de continuidad del flux total de masa, además de que se consideran resistencias a la transferencia de masa en esta frontera. Así también, entre la región- $\zeta$  y el permeado están presentes resistencias a la transferencias de masa. Además, no se considera transporte de masa de la especie  $A$  entre la región- $\eta$  y las paredes del tanque ( $\mathcal{A}_p$ ), ni entre la región- $\zeta$  y la atmósfera ( $\mathcal{A}_{sup}$ ). Esto último se traduce en suponer que no hay evaporación de la fase fluida. Se suponen conocidas las concentraciones iniciales de la especie  $A$  en las regiones  $\eta$  ( $c_{A\eta 0}$ ) y  $\zeta$  ( $c_{A\zeta 0}$ ); además, la concentración promedio de la especie  $A$  en la región- $\eta$  del tanque aerobio ( $c_A^\eta$ ) será la misma que la concentración de la especie  $A$  en la región- $\eta$  a la entrada del tanque de membrana ( $c_{A\eta e}$ ).

### 8.3.3 Adimensionalización

De forma similar a la adimensionalización de las ecuaciones del tanque aerobio, se presentan los siguientes cambios de variable:

$$\begin{aligned} c_{A\zeta}^* &= \frac{c_{A\zeta}}{c_\lambda}, & c_{A\eta}^* &= \frac{c_{A\eta}}{c_\lambda}, & c_{A\zeta 0}^* &= \frac{c_{A\zeta 0}}{c_\lambda}, & c_{A\eta 0}^* &= \frac{c_{A\eta 0}}{c_\lambda}, & \mathbf{D}_{ef}^* &= \frac{\mathbf{D}_{ef}}{\mathcal{D}_{AB}}, & \mathcal{D}_{A\eta}^* &= \frac{\mathcal{D}_{A\eta}}{\mathcal{D}_{AB}}, \\ t_D &= \frac{\ell_c^2}{\mathcal{D}_{AB}}, & t^* &= \frac{t}{t_D}, & \nabla^* &= \nabla \ell_c, & \mathbf{H}^* &= \frac{\mathbf{H}}{\ell_c^2}, & \mathbf{v}_{ef}^* &= \frac{\mathbf{v}_{ef}}{v_{ref}}, & \mathbf{v}_\eta^* &= \frac{\mathbf{v}_\eta}{v_{ref}}, & \mathbf{e}_{v_{ref}} &= \frac{\mathbf{v}_{ref}}{v_{ref}}, \\ \mathbf{v}_{ef sup}^* &= \frac{\mathbf{v}_{ef sup}}{v_{ref}}, & \langle \mathbf{v} \rangle^* &= \frac{\langle \mathbf{v} \rangle}{v_{ref}}, & \mathcal{P}_\eta^* &= \frac{\mathcal{P}_\eta}{\rho_\eta v_{ref}^2}, & \mathcal{P}_{atm}^* &= \frac{\mathcal{P}_{atm}}{\rho_\eta v_{ref}^2}, & \langle \mathcal{P} \rangle^* &= \frac{\langle \mathcal{P} \rangle}{\rho_c v_{ref}^2} \end{aligned} \quad (8.108)$$

donde  $*$  denota la naturaleza adimensional de la variable en cuestión; además,  $t_D$  es el tiempo característico de la difusión para la especie  $A$  en el tanque de membrana,  $t^*$  es el tiempo adimensional. También,  $v_{ref}$  es la velocidad de referencia, la cual es la máxima alcanzada dentro del sistema y  $\mathbf{e}_{v_{ref}}$  es un vector unitario en la dirección de la velocidad de referencia. Además, se utilizan las siguientes definiciones de números adimensionales:

**Definición 8.3.1 — Número de Reynolds.** Se utiliza para caracterizar el movimiento de un fluido, y se define como el cociente entre los esfuerzos inerciales y los viscosos. Como se puede notar, anteriormente se han definido dos diferentes números de Reynolds, uno para la región- $\eta$  ( $Re$ ) y uno para la región- $\zeta$  ( $Re_c$ ). Esto significa que el movimiento del fluido dentro y fuera de los casetes de ultrafiltración tendrá características diferentes por la diferente proporción de esfuerzos inerciales y viscosos. Esto repercute finalmente en el transporte de la especie  $A$ .

$$Re = \frac{\rho \eta v_{ref} \ell_c}{\mu}, \quad Re_c = \frac{\ell_c \rho_c v_{ref}}{\mu_{prom}} \quad (8.109)$$

**Definición 8.3.2 — Número de Péclet.** Se define como el la relación entre la velocidad de advección y la velocidad de difusión de la especie química. Números de Péclet ( $Pe$ ) mucho mayores a 1 ( $Pe \gg 1$ ) indican una dominancia por parte de la advección sobre el movimiento del fluido y la transferencia de masa; mientras que si  $Pe \ll 1$ , el fenómeno es dominado por la difusión molecular.

$$Pe = \frac{v_{ref} \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (8.110)$$

Este número adimensional se relaciona con el número de Reynolds de la siguiente manera:

$$Pe = \frac{\ell_c v_{ref}}{\mathcal{D}_{A\beta}} = Re Sc \quad (8.111)$$

donde  $Sc$  es el número Schmidt.

**Definición 8.3.3 — Número Schmidt.** Número adimensional definido como la relación entre la difusión de cantidad de movimiento y la difusión de masa.

Se definen también dos diferentes números de Biot, uno para la frontera entre la región- $\eta$  y la región- $\zeta$  ( $Bi_{\eta\zeta}$ ) y otro para la frontera entre la región- $\zeta$  y el permeado fuera del tanque ( $Bi_{\zeta o}$ ). La definición y consecuencias de un incremento o decremento del valor de este número adimensional son las mismas que aquellas discutidas para el tanque aerobio:

$$Bi_{\eta\zeta} = \frac{k^\zeta \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}}, \quad Bi_{\zeta o} = \frac{k^o \ell_c}{\mathcal{D}_{A\beta}} \quad (8.112)$$

Con base en estas definiciones, se obtienen las versiones adimensionales de las ecuaciones que

describen el transporte de masa y cantidad de movimiento, las cuales se muestran a continuación.

### Ecuaciones de transporte de masa total y cantidad de movimiento

Haciendo uso de los cambios de variable y definiciones dadas, las ecuaciones que gobiernan el transporte de masa total y cantidad de movimiento son:

$$\nabla^* \cdot \langle \mathbf{v} \rangle^* = 0, \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.113a)$$

$$\langle \mathbf{v} \rangle^* = -Re_c \mathbf{H}^* \cdot \nabla^* \langle \mathcal{P} \rangle^*, \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.113b)$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}_\eta^* = 0, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.113c)$$

$$\mathbf{v}_\eta^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}_\eta^* = -\nabla^* \mathcal{P}_\eta^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \mathbf{v}_\eta^*, \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.113d)$$

$$\mathbf{v}_\eta^* = \mathbf{v}_{ef}^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.113e)$$

$$\mathbf{v}_\eta^* = \mathbf{e}_{v_{ref}}, \quad \text{en } \mathcal{A}_e \quad (8.113f)$$

$$\mathbf{v}_\eta^* = \mathbf{0}, \quad \text{en } \mathcal{A}_p \quad (8.113g)$$

$$\mathcal{P}_\eta^* = \mathcal{P}_{atm}^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_{sup} \quad (8.113h)$$

$$\mathbf{v}_{ef}^* = \mathbf{v}_{efsup}^*, \quad \text{en } \mathcal{A}_o \quad (8.113i)$$

### Ecuaciones de transporte de masa de la especie A

De forma similar, se sustituyen los números y variables adimensionales definidos anteriormente, y descomponiendo al flux total en flux convectivo y difusivo se obtiene:

$$\frac{\partial c_{A\zeta}^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (c_{A\zeta}^* \mathbf{v}_{ef}^*) Pe = \nabla^* \cdot (\mathbf{D}_{ef}^* \cdot \nabla^* c_{A\zeta}^*), \quad \text{en la región-}\zeta \quad (8.114a)$$

$$\frac{\partial c_{A\eta}^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (c_{A\eta}^* \mathbf{v}_\eta^*) Pe = \nabla^* \cdot (\mathcal{D}_{A\eta}^* \nabla^* c_{A\eta}^*), \quad \text{en la región-}\eta \quad (8.114b)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\zeta}^* \mathbf{v}_\zeta^* Pe - \mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot (\mathbf{D}_{ef}^* \cdot \nabla^* c_{A\zeta}^*) = \mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\eta}^* \mathbf{v}_\eta^* Pe - \mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot (\mathcal{D}_{A\eta}^* \nabla^* c_{A\eta}^*), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.114c)$$

$$\mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot c_{A\zeta}^* \mathbf{v}_\zeta^* Pe - \mathbf{n}_{\eta\zeta} \cdot (\mathbf{D}_{ef}^* \cdot \nabla^* c_{A\zeta}^*) = Bi_{\eta\zeta} (c_{A\eta}^* - c_{A\zeta}^*), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\eta\zeta} \quad (8.114d)$$

$$\mathbf{n}_{\zeta o} \cdot c_{A\zeta}^* \mathbf{v}_\zeta^* Pe - \mathbf{n}_{\zeta o} \cdot (\mathbf{D}_{ef}^* \cdot \nabla^* c_{A\zeta}^*) = Bi_{\zeta o} (c_{A\zeta}^* - c_{Ao}^*), \quad \text{en } \mathcal{A}_{\zeta o} \quad (8.114e)$$

$$-\mathbf{n}_{\eta p} \cdot \mathcal{D}_{A\eta}^* \nabla^* c_{A\eta}^* = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_p \quad (8.114f)$$

$$\mathbf{n}_{\zeta sup} \cdot c_{A\zeta}^* \mathbf{v}_\zeta^* Pe - \mathbf{n}_{\zeta sup} \cdot (\mathbf{D}_{ef}^* \cdot \nabla^* c_{A\zeta}^*) = 0, \quad \text{en } \mathcal{A}_{sup} \quad (8.114g)$$

$$c_{A\eta e}^* = c_A^\eta, \quad \text{en } \mathcal{A}_e \quad (8.114h)$$

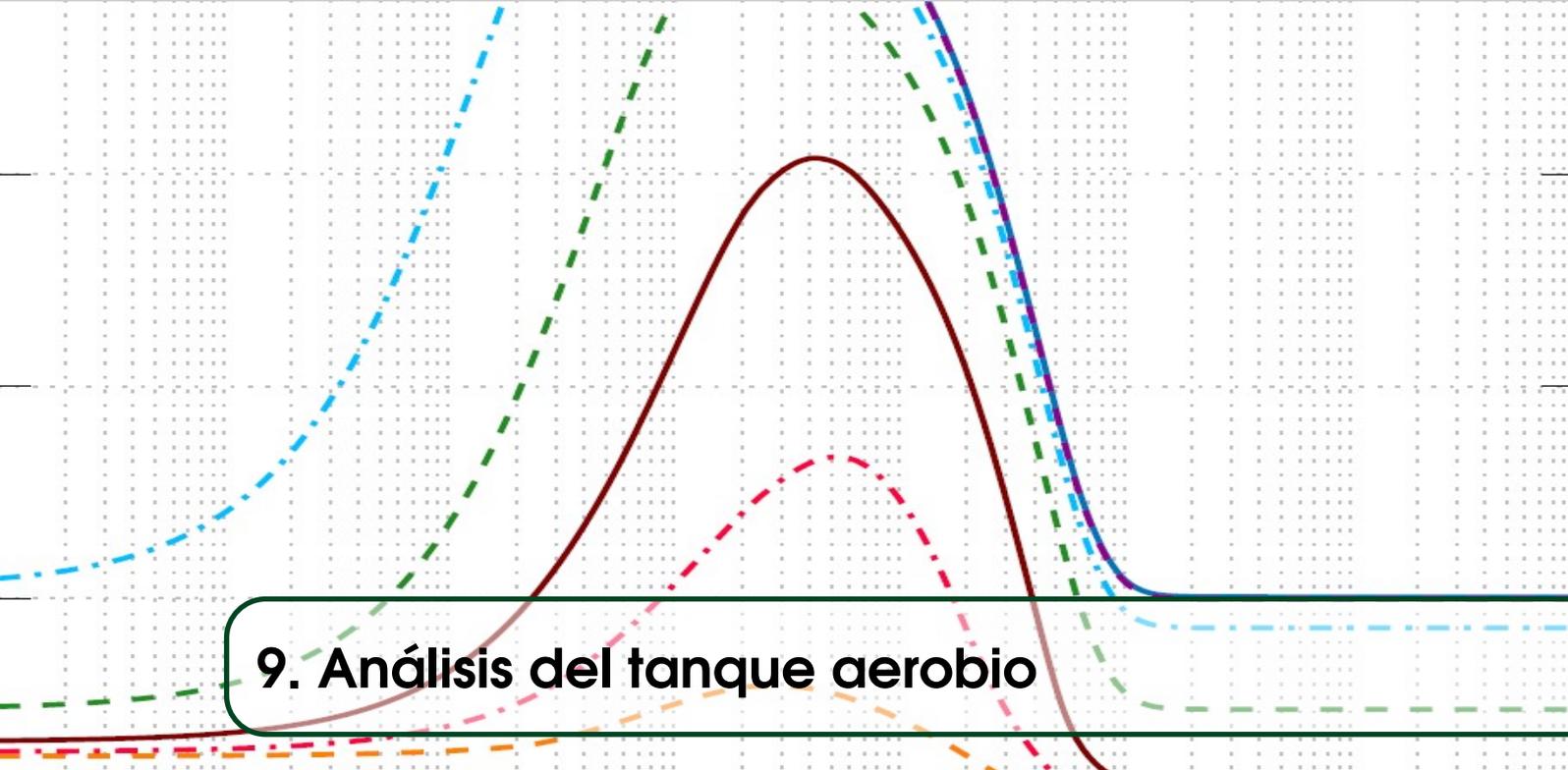
---

$$\text{Cuando } t = 0, \quad c_{A\zeta}^* = c_{A\zeta 0}^*, \quad c_{A\eta}^* = c_{A\eta 0}^* \quad (8.114i)$$

Una vez planteados los modelos para la especie A, se procede a resolverlos numéricamente. Esto se lleva a cabo en el capítulo 10.

# Resultados: Simulaciones numéricas

<b>9</b>	<b>Análisis del tanque aerobio . . . . .</b>	<b>132</b>
9.1	Análisis de la dinámica de la concentración de AGCL	
9.2	Análisis de la dinámica de la concentración de oxígeno	
9.3	Resumen del capítulo	
<b>10</b>	<b>Análisis del tanque de membrana . . .</b>	<b>154</b>
10.1	Simulación numérica de la mecánica de fluidos	
10.2	Simulación numérica del transporte de masa de la especie A	
10.3	Delimitación de los parámetros en el modelo	
10.4	Modelo 3D del tanque de membrana	
10.5	Resumen del capítulo	



## 9. Análisis del tanque aerobio

### Preliminares

En este capítulo se llevan a cabo las simulaciones numéricas y análisis del transporte de masa del tanque aerobio, esto conlleva la simulación, por separado, de los AGCL (sección 9.1) y del oxígeno (sección 9.2). El análisis para cada especie química es similar. En primer lugar, se realiza un análisis paramétrico, donde se delimita el intervalo aplicable de todos los parámetros y números adimensionales que involucran los modelos respectivos. Posteriormente, se evalúa la magnitud del efecto de estos, lo cual permite establecer las condiciones de diseño y operación que generan los mejores resultados en términos de la variable respuesta. Los resultados de estas dos secciones se llevan a cabo suponiendo un solo tamaño de flóculos. Posteriormente, se estudia el efecto que tiene la distribución de tamaños de flóculo sobre el consumo de AGCL y de oxígeno. Finalmente, se resumen los resultados obtenidos para ambas especies en la sección 9.3.

### 9.1 Análisis de la dinámica de la concentración de AGCL

Las ecuaciones adimensionales obtenidas para los AGCL que describen el transporte de masa en el tanque aerobio, fueron resueltas numéricamente en el software Comsol Multiphysics 5.5 (Anexo A). Para el análisis del tanque aerobio se utilizó una malla computacional con 1000 elementos. Esta malla fue seleccionada por provocar un error nulo con respecto a mallas más finas

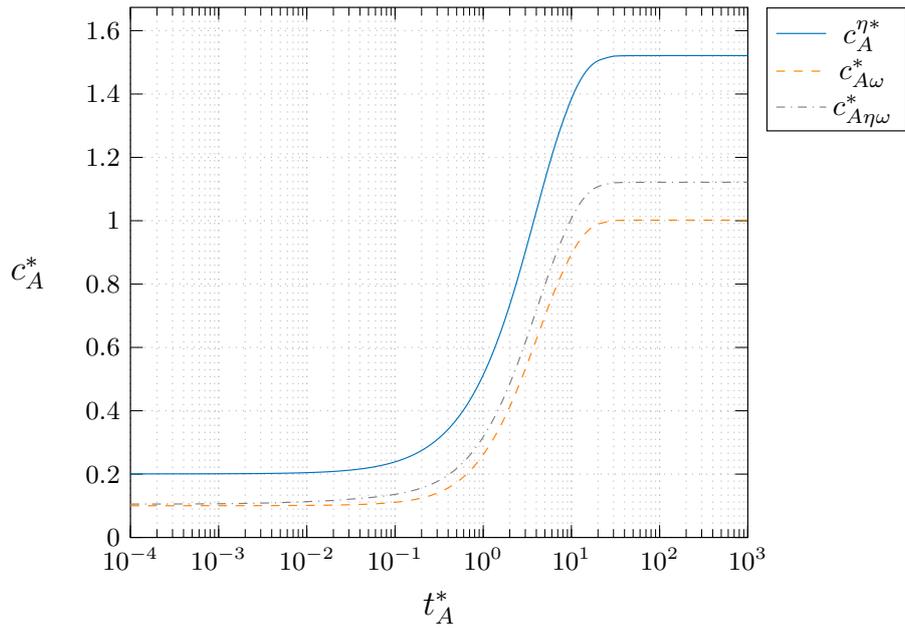


Figura 9.1. Dinámica de la concentración adimensional de la especie  $A$  en función del tiempo adimensional de operación.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.8$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 1$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta^*} = 0.2$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.1$ .

(2000 elementos), y permite una simulación precisa. Para comenzar la simulación, se fijaron valores dentro de magnitudes razonables reportadas en la literatura (ver referencias de la Tabla 9.1. La dinámica de la concentración de AGCL en las fases y regiones del tanque aerobio, en esta primera simulación numérica, se muestran en la Figura 9.1. Aquí se modela el caso en que al inicio, la concentración adimensional en la región líquida es 0.2, mientras que en los flóculos y la inter-región entre ambas es la misma y posee un valor de 0.1, representando la proporción con respecto a la concentración adimensional máxima.

Como se puede notar en la Figura 9.1, se grafican tres concentraciones diferentes, la primera es la concentración promedio de los AGCL en la región líquida ( $c_A^{\eta^*}$ ), la segunda corresponde a la concentración promedio en los flóculos ( $c_{A\omega}^*$ ), mientras que la tercera es la concentración de AGCL en la frontera entre la región líquida y los flóculos ( $c_{A\eta\omega}^*$ ). Estas tres concentraciones son importantes porque permiten evaluar tanto la generación como el consumo de los AGCL en el sistema. Se debe recordar que los AGCL se generan en la frontera entre la gota oleosa y la región líquida y se disuelve en la segunda. Por lo tanto, puede observarse que en primero, la concentración en la región líquida se ve incrementada. Posteriormente, los AGCL son transportados hacia los flóculos, por lo cual se observa un incremento en la concentración, primero en la interfase y posteriormente

en la concentración promedio de los flóculos. Todas las concentraciones adimensionales se ven incrementadas con tasas similares. Finalmente, las tres concentraciones llegan a un equilibrio, el cual depende de las condiciones iniciales y de la magnitud de los parámetros de transporte y reacción. En este caso particular, la concentración adimensional en la región líquida y la frontera sobrepasan la concentración máxima presente en la fase- $\lambda$  ( $c_\lambda$ ), y no se observa se esté llevando a cabo el fenómeno de degradación de los AGCL, es por tanto necesario realizar un análisis paramétrico que permita obtener valores para éstos que reflejen de mejor forma el proceso en estudio dentro del tanque aerobio para los AGCL.

Antes de proceder con el análisis paramétrico, es importante analizar la naturaleza de los modelos del tanque aerobio, a fin de aclarar la forma en que dicho análisis debe llevarse a cabo. Con excepción de los modelos para los flóculos, las ecuaciones gobernantes del transporte y reacción en el resto de las fases y regiones, tanto para la especie *A* como para la especie *B*, son ecuaciones lineales. Una de las características principales de los modelos lineales es su capacidad de superposición. La superposición implica que la salida debida a cada entrada es independiente de otras entradas del modelo, donde cada entrada hace referencia a un parámetro distinto. Es por esto posible realizar una serie de simulaciones de un sistema lineal examinando cada entrada por separado, y donde la salida del sistema para cualquier combinación de entradas es la suma de las salidas de la simulaciones individuales (Gray y Gray, 2017). A pesar de que, debido al término de consumo dado por un modelo de tipo Michaelis-Menten, la ecuación gobernante en los flóculos es no lineal, ha sido demostrado que las soluciones numéricas para este tipo de modelos pueden ser aproximados mediante modelos lineales de orden uno y cero (Valdés-Parada y *col.*, 2005). Esto da pauta para proceder con el análisis de esta ecuación de la misma forma que para un modelo lineal y a no requerir el análisis de la interacción entre los diferentes parámetros involucrados en estas ecuaciones y su repercusión sobre la variable respuesta.

### 9.1.1 Delimitación de los parámetros en el modelo

Para seleccionar la magnitud para cada parámetro adimensional, se buscaron en la literatura valores mínimos y máximos que estos pueden adoptar. Dichos valores se reportan en la Tabla 9.1, donde se listan las fuentes a partir de las cuales se proponen los intervalos para los valores. No todos los intervalos se establecieron a través de referencias bibliográficas para sistemas biológicos que involucran microorganismos. En algunos casos se tomaron referencias de rectores

Tabla 9.1. Intervalo de validez de los parámetros.

Parámetro	Min	Max	Referencias
$Bi_A$	0.1	10	Valdés-Parada y col. (2005)
$\phi_{\lambda\eta}^2$	0.1	2	Valdés-Parada y col. (2005); Villadsen (2016)
$a_{\eta\omega}^*$	0.1	1	
$a_{\eta\lambda}^*$	0.1	1	
$\varepsilon_e$	0.1	1	Wood y Whitaker (2000); Chu y Lee (2004a)
$\varepsilon_{P_A}$	0.1	$1 - \varepsilon_e - \varepsilon_{N_A}$	
$K_A^*$		1	
$\mu_{P_A}^*$	$1 \times 10^{-6}$	9	Hsu y col. (1983); Nakhla y col. (2006)
$\alpha_{P_A}^*$	$1 \times 10^{-3}$	9	Ji y col. (2015); Javed y col. (2018)
$\varepsilon_\eta$	0.6	1	
$\dot{Q}_e^*$	$3 \times 10^{-5}$	$5 \times 10^{-5}$	(GE, 2014)
$k$		0.25	Wood y Whitaker (2000)

químicos/biológicos, y por tanto, se realizaron ajustes a los intervalos. De esta forma, los parámetros fueron limitados por su propia definición y se establecieron los valores mínimos y máximos mediante la evaluación de simulaciones dentro del rango de valores dado por las referencias. A continuación se muestra el razonamiento detrás de los intervalos establecidos para los parámetros:  $Bi_A$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2$ ,  $a_{\eta\omega}^*$ ,  $a_{\eta\lambda}^*$ ,  $\varepsilon_{P_A}$ ,  $K_A^*$  y  $\varepsilon_\eta$ .

En la Figura 9.2 se muestra el caso particular del número de Biot para los AGCL ( $Bi_A$ ). Su valor, cuando no hay cambios ni en el sistema ni en las propiedades de las sustancias, depende principalmente del coeficiente interfacial de transferencia de masa, y éste, a su vez, del régimen de flujo y de los coeficientes de transporte en la región líquida. Con valores para el número de Biot por debajo de 0.1, aumentan las resistencias interfaciales a la transferencia de masa, lo cual ocasiona que se transporten pocos AGCL al interior del flóculo con respecto a la cantidad que los flóculos pueden oxidar. Bajo estas condiciones, los flóculos se encontrarían subutilizados y la condición de operación consistirá en una baja tasa de mezclado. Números de Biot por debajo de 0.1 se ven reflejados como un incremento en la concentración adimensional de la especie A en región líquida del tanque con respecto al tiempo adimensional. Por tratarse de un tanque agitado neumáticamente, reducir la agitación se relaciona con una disminución en la tasa de aireación y por lo tanto en una menor tasa de suministro de oxígeno. A valores altos del Biot, por arriba de 10, se reducen las

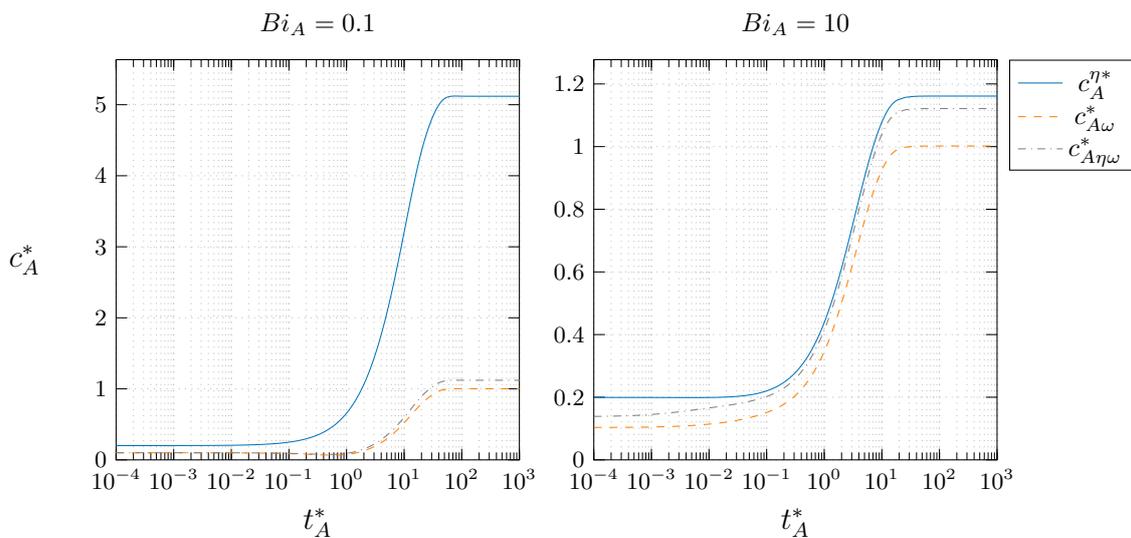


Figura 9.2. Efecto del número de Biot en la dinámica de la concentración adimensional de la especie A.  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.8$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 1$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 0.2$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.1$ .

resistencias interfaciales a la transferencia de masa. En este caso, se transporta mayor cantidad de AGCL con respecto a la que se oxida, saturando a los flóculos. Valores por arriba de 10 no mejoran la oxidación de los AGCL. Además, para conseguir valores altos de Biot, es necesaria una agitación vigorosa en régimen turbulento, lo cual implica más aireación y a su vez un mayor consumo energético.

El módulo de Thiele para la frontera entre la fase oleosa y la región líquida ( $\phi_{\lambda\eta}^2$ ) se define como la relación entre la tasa de reacción y la tasa de difusión de los AGCL. Esto puede interpretarse como la eficiencia de la reacción de hidrólisis de G&A a AGCL en esta frontera. De acuerdo con la Figura 9.3, a valores por debajo de 0.1 para el módulo de Thiele, la concentración de AGCL en el tanque cae rápidamente debido a su consumo en los flóculos, de la misma forma que para valores bajos del Biot. Esto provoca que se subutilicen los flóculos, pues se transporta menor concentración de AGCL de la que son capaces de oxidar. Sin embargo, se observó que valores por arriba de 2 saturan al sistema por ser mucho mayor la tasa de hidrólisis que la de oxidación.

El área interfacial entre la región líquida y los flóculos ( $a_{\eta\omega}^*$ ) es un parámetro que depende del área total interfacial de los flóculos. Dicha superficie puede incrementarse al aumentar el número de flóculos en el tanque o aumentar el tamaño de éstos, y disminuir al reducir su número o su tamaño. La relación superficie del flóculo - volumen del tanque es uno de los factores que determinan la velocidad con la cual ocurre la oxidación. A valores de esta área interfacial por debajo de 0.1, la tasa

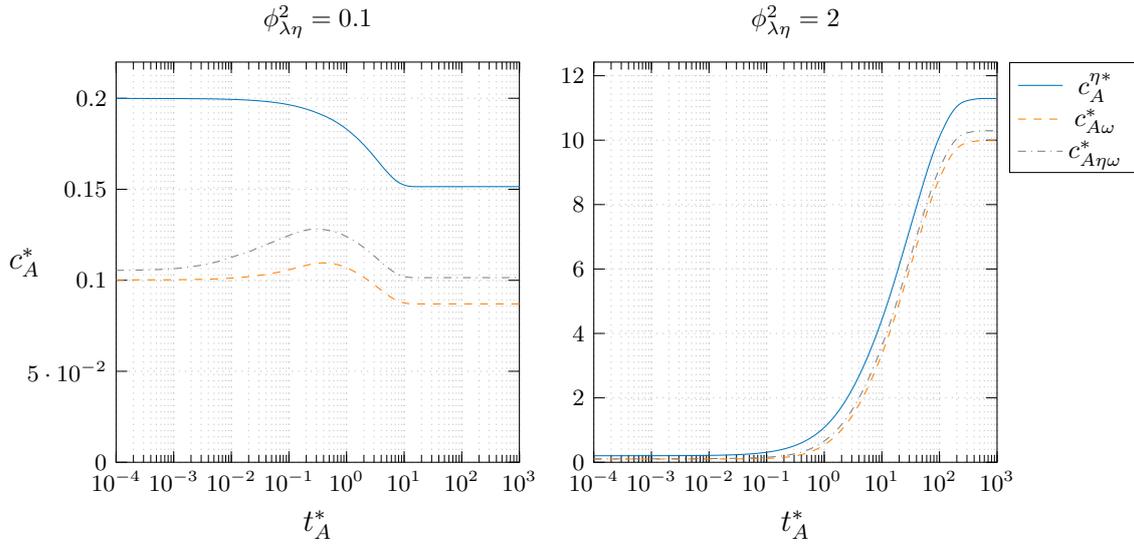


Figura 9.3. Efecto del módulo de Thiele en la dinámica de la concentración adimensional de la especie A.  $Bi_A = 1$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 1$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 0.2$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.1$ .

de oxidación es mínima, por lo cual los AGCL se acumulan en el tanque. Como se observa en la Figura 9.4, conforme aumenta el área interfacial se lleva a cabo una mayor oxidación de los AGCL; sin embargo, esto requiere un aumento en el número de flóculos. Los MBR son capaces de operar a altas concentraciones de biomasa, de entre 7 y 13.5g L<sup>-1</sup> (Itokawa y col., 2008); sin embargo, se debe fijar un límite a ésta ya que una alta concentración de flóculos afecta a las condiciones de mezclado y transporte de las especies. En este estudio se considera como límite máximo  $a_{\eta\omega}^* = 1$ , dado que por arriba de este valor no podría considerarse que el sistema es un tanque donde los flóculos están dispersos, sino que asemejaría más a un sistema de lecho empacado.

El área interfacial entre la región líquida y la fase oleosa ( $a_{\eta\lambda}^*$ ) tiene una definición similar a  $a_{\eta\omega}^*$ , pero aplicada a la hidrólisis que tiene lugar en la frontera entre la fase oleosa y la región líquida. Por lo tanto, puede restringirse también a valores entre 0.1 y 1 (datos no mostrados por brevedad en la presentación de resultados). La diferencia radica en que un aumento de esta área interfacial incrementa la concentración de AGCL disueltos en la región líquida, mientras que una disminución del área tendrá un efecto contrario. Esto se debe a que se lleva a cabo la generación de AGCL en esta frontera y la cantidad de AGCL generados es directamente proporcional a la tasa de hidrólisis.

Otro parámetro relacionado con la tasa de oxidación es la fracción volumétrica de células que consumen a los AGCL ( $\varepsilon_{P_A}$ ). Entre mayor sea este número, mayor cantidad de la especie A podrá ser

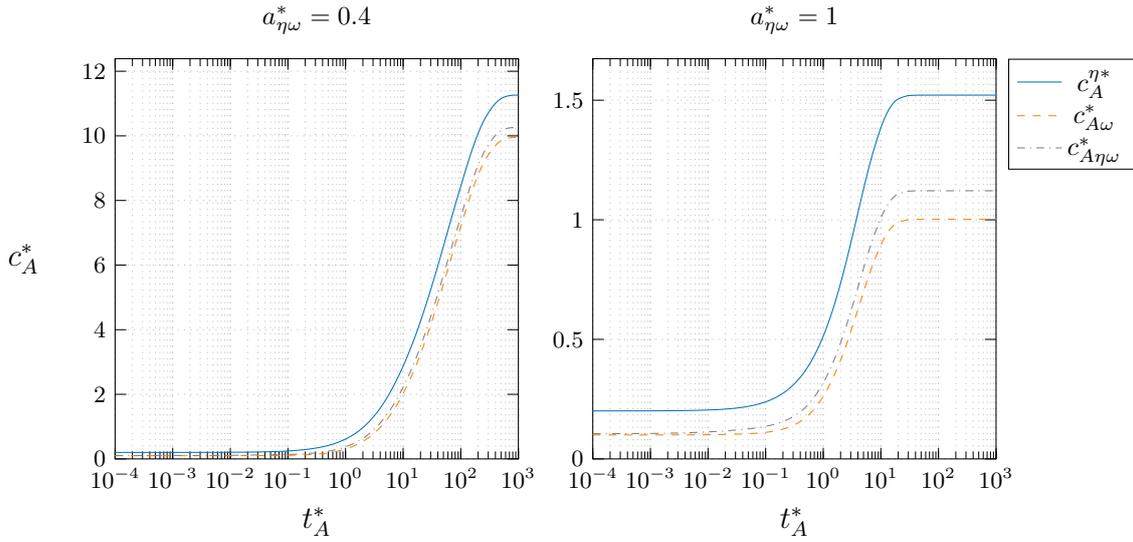


Figura 9.4. Efecto del área interfacial entre la región fluida y los flóculos en la dinámica de la concentración adimensional de la especie A.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.8$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 0.2$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.1$ .

oxidada por flóculo y por unidad de tiempo. Sin embargo, dado que entre la fracción volumétrica de las células que consumen AGCL, de las células que no consumen ( $\varepsilon_{N_A}$ ) y de la matriz extracelular ( $\varepsilon_e$ ) conforman la fracción total del flóculo, su valor no puede sobrepasar la unidad. Más aún, su límite superior estará dado por  $1 - \varepsilon_e - \varepsilon_{N_A}$ . Al contrario, cuando el valor de la fracción volumétrica de las células que consumen se encuentra por debajo de 0.1, la tasa de oxidación es mínima aunque haya gran cantidad de flóculos en el tanque (datos no mostrados).

La constante de equilibrio termodinámico ( $K_A^*$ ) representa la cantidad de AGCL que son transportados hacia las células que los consumen con respecto a la que se encuentra en la matriz extracelular. Ésta se supuso igual a 1, limitando la aplicación al caso particular donde ambas concentraciones se encuentran en equilibrio.

Finalmente, la fracción volumétrica de la región líquida con respecto al volumen total del tanque aerobio ( $\varepsilon_\eta$ ), también debe ser limitada. Por cuestiones operativas, generalmente esta fracción es la mayoritaria para poder llevar a cabo cualquier proceso con células o algún tipo de agregado celular en suspensión. Para que esto se cumpla,  $\varepsilon_\eta$  debe ser más del 60% del volumen del tanque y no puede exceder el 100%. Por lo tanto, sus valores se encontrarán entre 0.6 y 1.

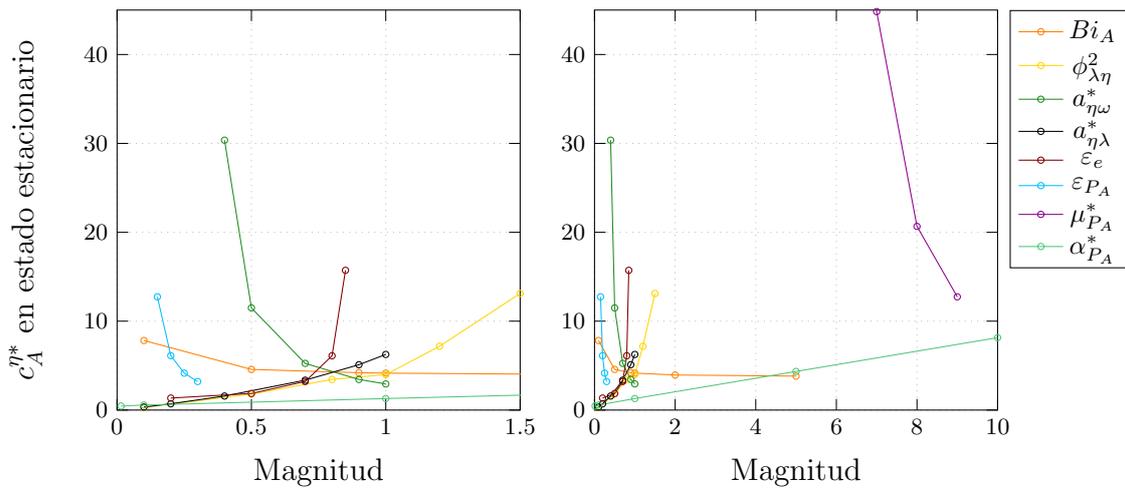


Figura 9.5. Análisis del tamaño del efecto generado por la variación de cada parámetro.

### 9.1.2 Estimación de la magnitud de cada efecto

Una forma de visualizar la magnitud de la variación de la concentración de AGCL disueltos en la región líquida es mediante la realización de un barrido de valores dentro de su intervalo definido en la sección anterior. De esta forma, es posible detectar el tipo de efecto que ejerce cada parámetro, es decir, si tiene un efecto positivo o negativo en la concentración en estado estacionario. Así también, este análisis permite identificar aquellos parámetros a los que es más sensible el modelo, o sea, aquellos que con mínimas variaciones generan grandes cambios. En la Figura 9.5 se reporta el resultado de dicho análisis, donde se observa que parámetros como  $Bi_A$ ,  $\alpha_{P_A}^*$  generan pendientes cercanas a cero. Mientras que los factores que más influyen en la concentración de los AGCL en la región líquida, evidenciado por pendientes pronunciadas, son principalmente  $a_{\eta\omega}^*$ ,  $\epsilon_e$  y  $\epsilon_{P_A}$ .

Complementando este análisis, en la Tabla 9.2 se encuentran todos los parámetros involucrados, agrupados en tres secciones. La clasificación se llevó a cabo de acuerdo con el orden de magnitud de la pendiente. La columna de cambio máximo de la pendiente reporta los valores, para cada parámetro, donde la variación de la variable respuesta fue mayor, y corresponden con las pendientes máximas de las curvas presentadas en la Figura 9.5. Valores absolutos más grandes son evidencia de un mayor efecto, mientras que el signo de estos hace referencia a si el efecto es positivo (donde un aumento en la magnitud del parámetro conlleva un aumento en la concentración de AGCL) o negativo (donde un aumento en la magnitud del parámetro genera una disminución en la concentración). La columna de condición de máximo cambio indica en qué sección del intervalo, donde se evaluaron los parámetros, es posible encontrar el mayor efecto de cada parámetro sobre

Tabla 9.2. Tamaño del efecto de los parámetros para la especie A.

Parámetro	Cambio máximo de la pendiente	Condición de máximo cambio
$a_{\eta\omega}^*$	-188.7	bajos (0.6–0.8)
$\epsilon_e$	192.28	altos (0.7–0.8)
$\epsilon_{P_A}$	-132.4	bajos (0.2–0.3)
$\mu_{P_A}^*$	-81.68	todo el dominio ( $1 \times 10^{-6}$ –9)
$\phi_{\lambda\eta}^2$	19.79	altos (1–2)
$a_{\eta\lambda}^*$	11.54	altos (0.8–1)
$\alpha_{P_A}^*$	0.76	todo el dominio ( $1 \times 10^{-3}$ –9)
$Bi_A$	-0.01	bajos (0.1–0.5)

la variable respuesta.  $a_{\eta\omega}^*$ , por ejemplo, genera mayores cambios cuando su magnitud es baja. La sección en verde son aquellos parámetros que ejercen gran efecto (orden de magnitud de  $10^2$ ) sobre la variable respuesta, la sección en amarillo identifica a aquellos que tienen un efecto moderado (orden de magnitud de  $10^1$ ) sobre  $c_A^{\eta*}$ , y los que se encuentran en naranja son aquellos que prácticamente no tiene efecto (orden de magnitud de  $< 10^{-2}$ ) sobre la variable. Parámetros con valor fijo o intervalos muy cortos no fueron analizados por la poca información adicional que proporciona su análisis.

Con el fin de determinar las condiciones ideales para simular la operación del tanque aerobio, se recurrió a pruebas iterativas utilizando el intervalo antes definido para cada variable y considerando el tamaño del efecto que cada una posee sobre la variable respuesta. Es importante mencionar que para la elaboración de estas gráficas se llevó a cabo una normalización, utilizando la concentración máxima de AGCL en la región líquida que corresponde con la primer gráfica de la Figura 9.6. A continuación se muestra el mecanismo usado para obtener las condiciones finales seleccionadas para modelar el tanque aerobio: En la Figura 9.6 se fijaron todos los parámetros y se varió la magnitud para la tasa máxima de consumo de AGCL, a manera representativa se reportan los resultados para  $\mu_{P_A}^* = 7$ ,  $\mu_{P_A}^* = 8$  y  $\mu_{P_A}^* = 9$ , en este orden. Posteriormente, se selecciona el valor de  $\mu_{P_A}^*$  que genere el efecto deseado sobre la concentración de AGCL (menor concentración promedio en la región líquida) y éste reemplaza al valor que antes se tenía fijo para esta variable. De esta forma, en la Figura 9.7 muestran los resultados para  $\mu_{P_A}^* = 9$ , donde se han fijado todos los demás parámetros y varía la magnitud del módulo de Thiele, mostrándose el resultado para los siguientes valores de  $\phi_{\lambda\eta}^2$ : 0.9, 0.5 y 0.35. Se puede notar a través de las tres figuras cómo la concentración de

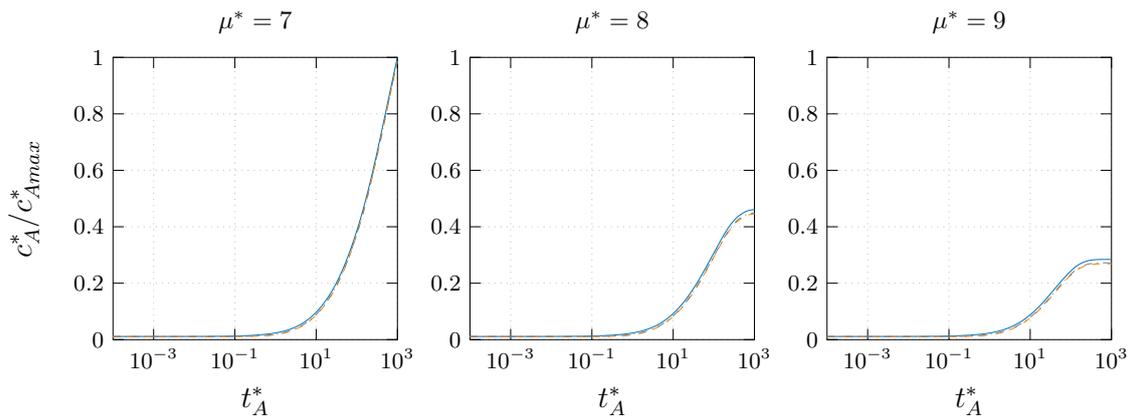


Figura 9.6. Efecto de la variación de  $\mu_{p_A}^*$  sobre la concentración de la especie A.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.9$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 1$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{p_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\alpha_{p_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ .

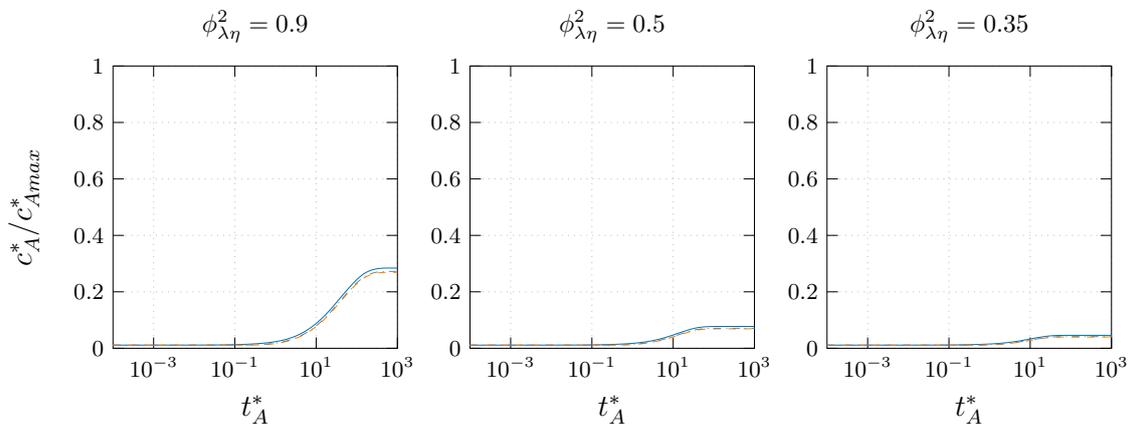


Figura 9.7. Efecto de la variación de  $\phi_{\lambda\eta}^2$  sobre la concentración de la especie A.  $Bi_A = 1$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 1$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.5$ ,  $\varepsilon_e = 0.6$ ,  $\varepsilon_{p_A} = 0.4$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{p_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{p_A}^* = 2$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.8$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 0.2$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.1$ .

AGCL en la región líquida disminuye, indicando un mayor consumo.

### 9.1.3 Condiciones finales para la simulación de la operación del tanque aerobio

Una vez realizado el análisis de los parámetros para el modelo del tanque aerobio, se seleccionan las magnitudes de éstos que presenten mejores resultados en cuanto al consumo de los AGCL. Para ello, se utilizan los intervalos establecidos en la Tabla 9.1 y, con ayuda del entendimiento del efecto de los parámetros sobre la variable respuesta, se obtienen las mejores condiciones de operación. Dichas condiciones corresponden a aquellas que promueven la oxidación de AGCL, limitando la concentración de esta especie química en la región líquida a la salida del tanque. La dinámica de la concentración adimensional resultante se reporta en la Figura 9.8. Para ésta, se utilizaron las siguientes condiciones iniciales para la concentración adimensional de AGCL: 1 para la región

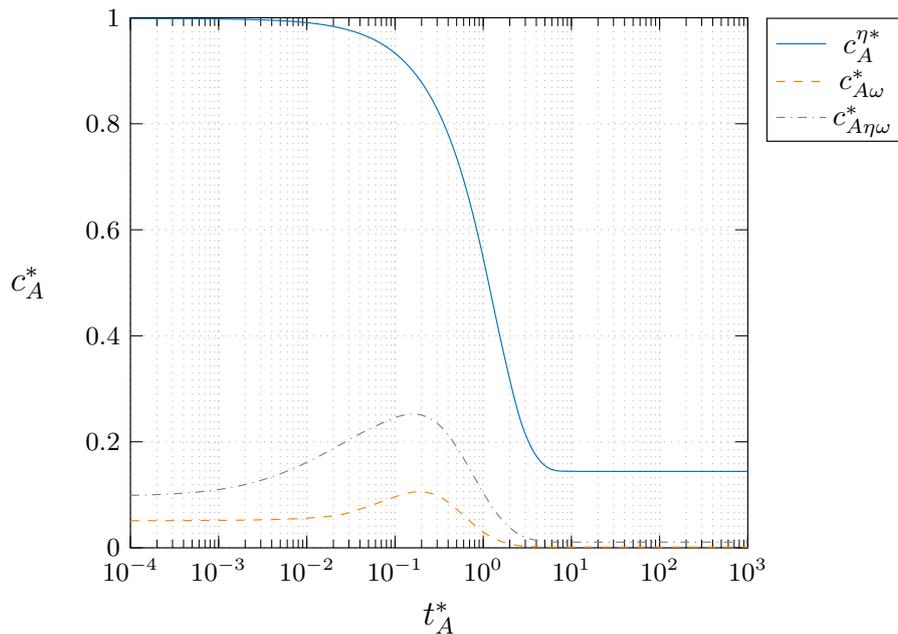


Figura 9.8. Concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.15$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.8$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.25$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 0.003$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta^*} = 1$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.05$ .

líquida, 0.05 para los flóculos. En la figura se observa que la concentración dentro de los flóculos se encontraba a un determinado nivel y en equilibrio. Con el paso del tiempo, la concentración en los flóculos presenta un ligero incremento debido a la mayor tasa de transporte que de oxidación, para finalmente oxidar este excedente de AGCL y encontrar condiciones estables alrededor del tiempo seis adimensional. La misma tendencia se observa en la concentración interfacial de los flóculos. En la región líquida, la concentración de AGCL disueltos decrece sigmoidalmente debido a la acción de los flóculos, hasta encontrar un punto de estabilidad simultáneo al de los flóculos y su frontera. La concentración final de AGCL se mantiene en un valor de 0.17.

#### 9.1.4 Casos particulares de operación

Con el programa de simulación numérica es posible representar lo que tendría lugar en el tanque, dadas determinadas condiciones de operación. A manera de ejemplo, en la Figura 9.9 se muestra el caso particular donde la concentración de AGCL presente en la alimentación del tanque disminuye a la mitad (0.5). Se puede observar el mismo comportamiento antes descrito; sin embargo, se modifica la concentración adimensional de AGCL en estado estacionario, siendo éstos ligeramente menores (por debajo de 0.15) con respecto a cuando la carga de AGCL es de 1.

Otra situación que puede tener lugar durante la operación del sistema de tratamiento, o a

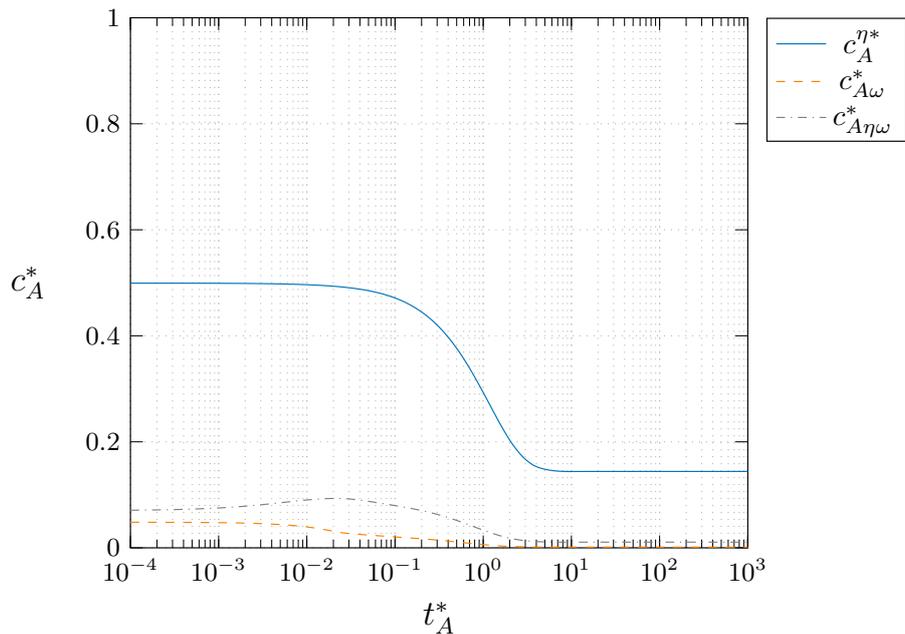


Figura 9.9. Efecto de una reducción en la concentración de la alimentación del tanque aerobio sobre la dinámica de degradación y oxidación de los AGCL.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.15$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.8$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{PA} = 0.25$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{PA}^* = 9$ ,  $\alpha_{PA}^* = 0.003$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 0.5$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.05$ .

manera de pretratamiento, es la adición de enzimas hidrolíticas en búsqueda de una mejora en la degradación de G&A (Cammarota y Freire, 2006; Jeganathan y *col.*, 2006, 2007). Incrementando la magnitud de  $\phi_{\lambda\eta}^2$  de 0.15 a 0.3 se llevó a cabo la simulación de este caso particular (Figura 9.10). Se observa que un incremento en la tasa de hidrólisis satura el sistema, y a pesar de que se lleva a cabo la degradación, ésta no es suficiente como para que el efluente del tanque tenga concentraciones adimensionales por debajo de 0.3. Esto quiere decir que aumentar la tasa de hidrólisis generará un efluente con mayor concentración de AGCL por la saturación del sistema, y a su vez, una baja eficiencia de degradación en el MBR. Siendo esto un efecto indeseable durante la operación de los sistemas de tratamiento de aguas residuales.

### 9.1.5 Distribución de tamaños de flóculo

De acuerdo con la literatura, los MBR y, en general, los sistemas que involucran biomasa flocular, no contienen un único y uniforme tamaño de flóculo, sino que poseen una distribución de tamaños (Chu y Lee, 2004b; Spérandio y *col.*, 2005; Delgado y *col.*, 2011; Wu y *col.*, 2012; Shen y *col.*, 2015). Se revisaron los trabajos de Delgado y *col.* (2011); Wu y *col.* (2012) como referencia para generar la distribución de tamaños en el presente trabajo, de donde se seleccionaron

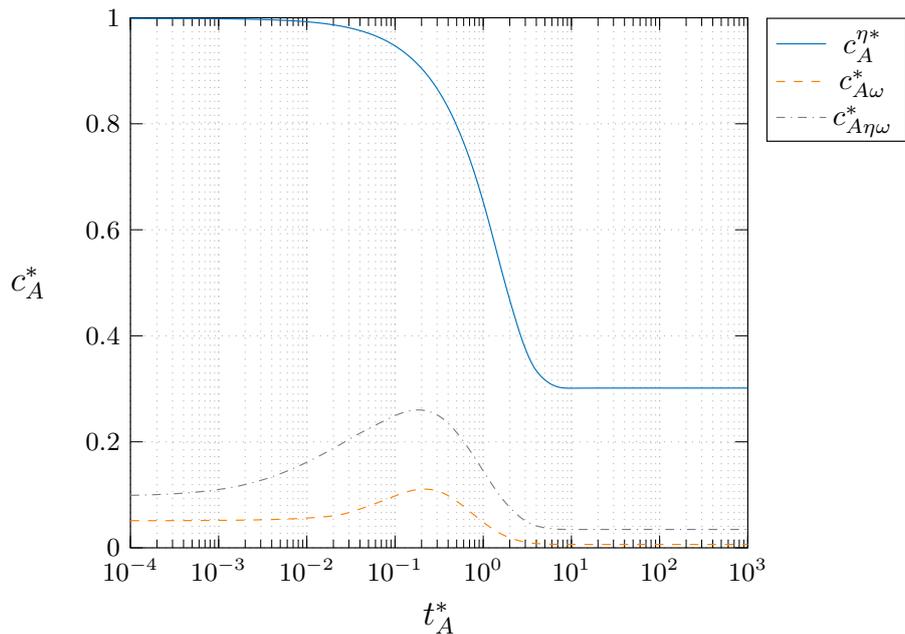


Figura 9.10. Efecto de un incremento en la tasa de hidrólisis de G&A sobre la oxidación de los AGCL.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.3$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.8$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{p_A} = 0.25$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{p_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{p_A}^* = 0.003$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta^*} = 1$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.05$ .

seis tamaños diferentes, y considerando el porcentaje del volumen reportado para cada uno, se incorporó la distribución al programa de simulación (Figura 9.11). Aquí se grafica la concentración promedio de cada radio de flóculo, donde el flóculo más grande es de  $55\mu\text{m}$  y el más pequeño de  $5\mu\text{m}$ . Conforme disminuye el radio de los flóculos, es mayor la concentración promedio de los AGCL dentro de ellos, evidenciando una baja capacidad de oxidación de esta especie. Como se puede observar, y comparando con la Figura 9.8, el consumo de AGCL promedio entre todos los flóculos disminuye. Esto se puede atribuir a que, al definir la distribución de tamaños, se incorporan flóculos más pequeños que el inicialmente contemplado ( $55\mu\text{m}$ ). En sinergia, se presenta un menor consumo de AGCL cuando se considera que no todos los flóculos son del tamaño de flóculo más grande.

Con esto concluye el análisis de la dinámica de la concentración de AGCL en el tanque aerobio. Estos resultados se utilizarán como valores de entrada para las simulaciones que se presentan en el capítulo 10. A continuación se procede al análisis de la dinámica de la concentración de oxígeno dentro del tanque aerobio.

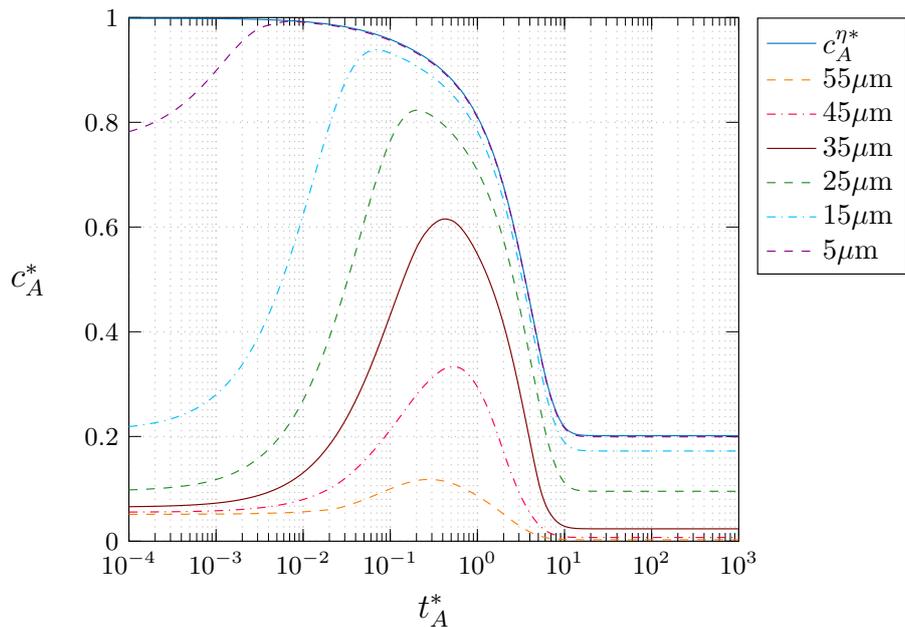


Figura 9.11. Dinámica de la concentración adimensional de la especie  $A$  considerando diferentes tamaños de flóculo.  $Bi_A = 1$ ,  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.15$ ,  $a_{\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.8$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{P_A} = 0.25$ ,  $K_A^* = 1$ ,  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 0.003$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ . Condiciones iniciales:  $c_{A0}^{\eta*} = 1$ ,  $c_{A\omega j0}^* = 0.05$ .

## 9.2 Análisis de la dinámica de la concentración de oxígeno

De la misma manera que para los AGCL, las ecuaciones adimensionales obtenidas para el oxígeno que describen el transporte de masa en el tanque aerobio fueron introducidas al software Comsol Multiphysics 5.5 como se detalla en el Anexo B. Para comenzar la simulación se fijaron valores para los parámetros que requiere el modelo adimensional. El resultado de esta primera simulación para la dinámica de la concentración del oxígeno, se muestra en la Figura 9.12. Aquí se modela el caso en el que la saturación de oxígeno en la región líquida se encuentra al 20%, en ese momento se suministra aire. Inicialmente la concentración de oxígeno disuelto en la región líquida disminuye, permanece momentáneamente a alrededor del 30% de saturación y posteriormente incrementa con pendiente similar a la de consumo. En un caso práctico, este comportamiento es indeseable, dado que representa una aireación en exceso y esto conlleva a un gasto energético mayor. Para poder seleccionar la magnitud de los parámetros para el modelo del oxígeno, se procede a delimitar el valor que estos pueden adoptar mediante una búsqueda en la literatura.

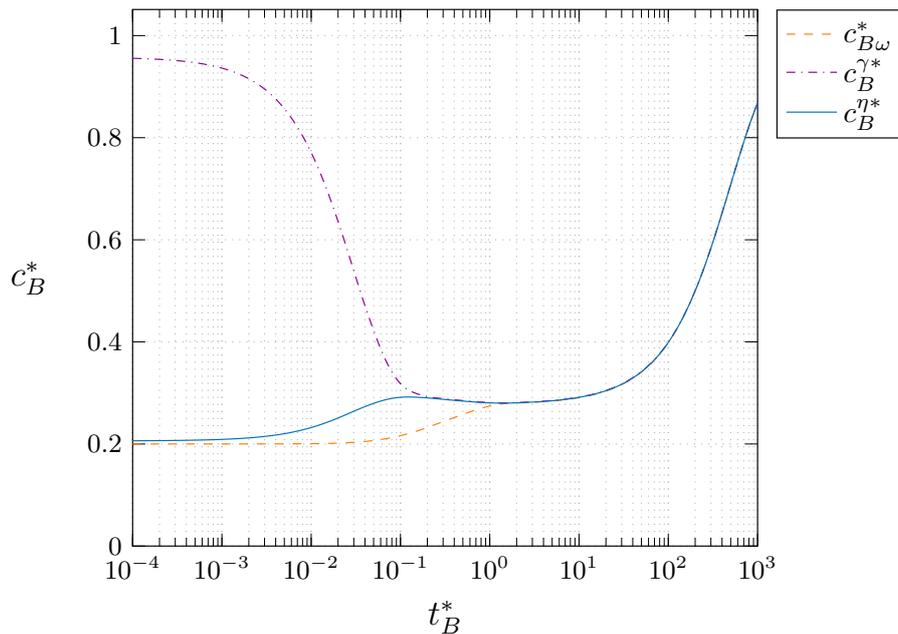


Figura 9.12. Concentración adimensional de la especie B en función del tiempo adimensional de operación.  $a_{B\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\gamma}^* = 0.7$ ,  $Bi_B = 1$ ,  $Bi_{\gamma\eta} = 5$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{P_B} = 0.28$ ,  $K_B^* = 1$ ,  $\mu_{P_B}^* = 0.00078$ ,  $\alpha_{P_B}^* = 0.00257$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ ,  $\varepsilon_\gamma = 0.12$ ,  $\cdot Q_d^* = 0.0024$ . Condiciones iniciales:  $c_{B0}^{\gamma^*} = 1$ ,  $c_{B0}^{\eta^*} = 0.2$ ,  $c_{B\omega,0}^* = 0.2$ .

### 9.2.1 Delimitación de los parámetros en el modelo

En la Tabla 9.3 se muestran los límites inferiores y superiores para la magnitud de cada uno de los parámetros requeridos para llevar a cabo la simulación numérica del oxígeno en el tanque aerobio. Puede notarse que algunos de estos tienen como condición que deben adoptar el mismo intervalo de valores que para los AGCL. Es entonces que, para delimitar a los parámetros:  $a_{\eta\gamma}^*$ ,  $Bi_B$ ,  $Bi_{\gamma\eta}$ ,  $\varepsilon_{P_B}$  y  $K_B^*$ , las suposiciones aplicadas para sus contrapartes en las ecuaciones de los AGCL pueden ser aquí también aplicadas y no es necesario llevar a cabo nuevamente el análisis de estos parámetros.

### 9.2.2 Estimación de la magnitud de cada efecto

De la misma forma que con los AGCL, es necesario realizar un análisis para evaluar la magnitud de cada parámetro que permita representar el fenómeno de consumo de oxígeno que tiene lugar en el tanque aerobio. Para facilitar esto, a continuación se muestran los resultados de la estimación del tamaño del efecto. En la Figura 9.13 se muestran curvas que representan el cambio generado en la variable dependiente de acuerdo a la variación de cada parámetro. Es posible notar que los parámetros que generan mayor cambio en la concentración son  $\dot{Q}_d^*$  y  $\mu_{P_B}^*$ . Para esta especie existe

Tabla 9.3. Intervalo de validez de los parámetros.

Parámetro	Min	Max	Referencias
$a_{B\eta\omega}^*$	0.1	1	Limitado a 0.9 por la especie A
$a_{\eta\gamma}^*$	0.1	1	Das y col. (1985)
$Bi_B$	0.1	10	Valdés-Parada y col. (2005)
$Bi_{\gamma\eta}$	0.1	10	Valdés-Parada y col. (2005)
$\varepsilon_e$	0.1	1	Limitado a 0.7 por la especie A
$\varepsilon_{P_B}$	0.1	$1-\varepsilon_e$	
$K_B^*$		1	
$\mu_{P_B}^*$	$1 \times 10^{-5}$	0.9	García-Ochoa y col. (2010)
$\alpha_{P_B}^*$	$1 \times 10^{-3}$	0.09	Khakpour y col. (2017); Mines (2019)
$\dot{Q}_e^*$	$3 \times 10^{-5}$	$5 \times 10^{-5}$	Limitado a 0.0003 por la especie A
$k$		0.25	Wood y Whitaker (2000)
$\varepsilon_\eta$	0.6	1	Limitado a 0.85 por la especie A
$\dot{Q}_d^*$	$1 \times 10^{-3}$	0.024	(Moilanen y col., 2005)
$\varepsilon_\gamma$	0.1	0.4	(Das y col., 1985)

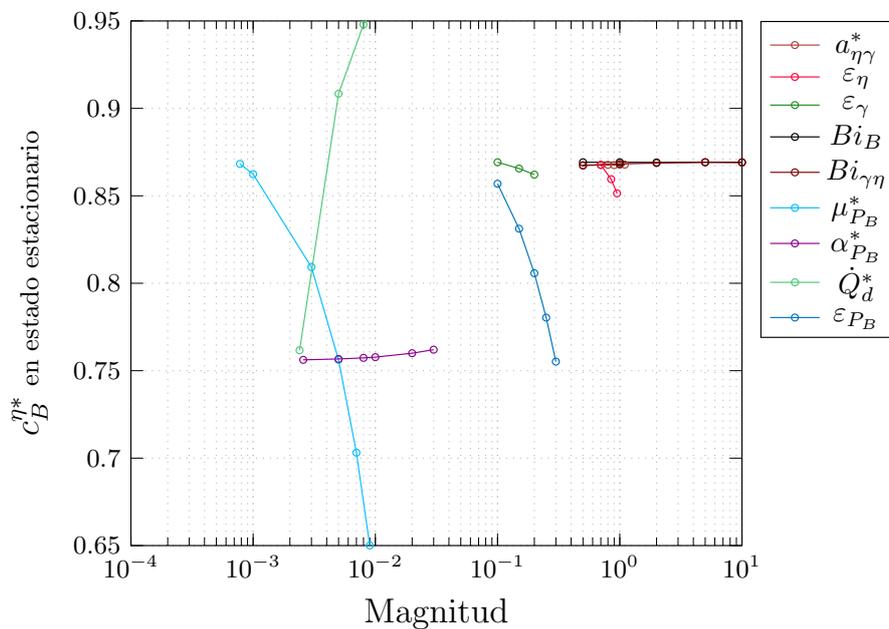


Figura 9.13. Análisis del tamaño del efecto sobre la concentración de oxígeno, generado por la variación de cada parámetro.

una mayor cantidad de parámetros que prácticamente no tienen efecto en la variable respuesta, a diferencia de para los AGCL. Estos parámetros son:  $\varepsilon_\gamma$ ,  $a_{\eta\gamma}^*$ ,  $Bi_B$  y  $Bi_{\gamma\eta}$ .

Para complementar el análisis, en la Tabla 9.4 se puede encontrar la pendiente o cambio máximo

Tabla 9.4. Tamaño del efecto de los parámetros para la especie *B*.

Parámetro	Cambio máximo de la pendiente
$\dot{Q}_d^*$	56.42
$\mu_{P_B}^*$	-26.52
$\varepsilon_{P_B}$	-0.5
$\alpha_{P_B}^*$	0.19
$\varepsilon_\gamma$	-0.7
$a_{\eta\gamma}^*$	0.00037
$Bi_B$	0.0004
$Bi_{\eta\gamma}$	0.0019

generado por cada parámetro, así como si este efecto es positivo o negativo de acuerdo con si aumenta o disminuye la concentración de oxígeno, respectivamente. Para esta especie no se muestra el intervalo de magnitudes donde los parámetros generan su mayor efecto, esto debido a que durante todo su dominio la pendiente es prácticamente constante.

### 9.2.3 Condiciones finales para la simulación de la operación del tanque aerobio

Una vez que se cuenta con el intervalo donde son válidos los parámetros y que se ha realizado el análisis del tamaño del efecto, se procede a seleccionar la magnitud que permita representar al fenómeno que tiene lugar en el tanque aerobio. Los valores de los parámetros, así como el resultado para la dinámica de la concentración de oxígeno, se muestran en la Figura 9.14. Aquí se utilizaron las siguientes condiciones iniciales para la concentración adimensional de oxígeno: 0.2 para la región líquida y los flóculos, 1 para la fase gas. Se busca mantener estable la concentración de oxígeno disuelto en alrededor del 30 % para la operación del tanque aerobio. Es posible observar cómo la concentración de oxígeno de la fase gas cae desde el momento en que comienza la aireación, y posteriormente busca el equilibrio con la región líquida en alrededor del 30 % de saturación. Dentro de los flóculos, la concentración tiene un ligero cambio pero en todo momento se mantiene entre 0.2 y 0.3 (Wang y Zhong, 2007), indicando que no habrá escasez de oxígeno que pueda afectar negativamente a la biomasa de los flóculos.

Para finalizar el análisis de esta sección, y para facilitar la interpretación de los resultados obtenidos para ambas especies químicas, se evalúa dimensionalmente el tiempo en el cual tanto la concentración de AGCL como de oxígeno llegan al estado estacionario en el tanque aerobio. Para

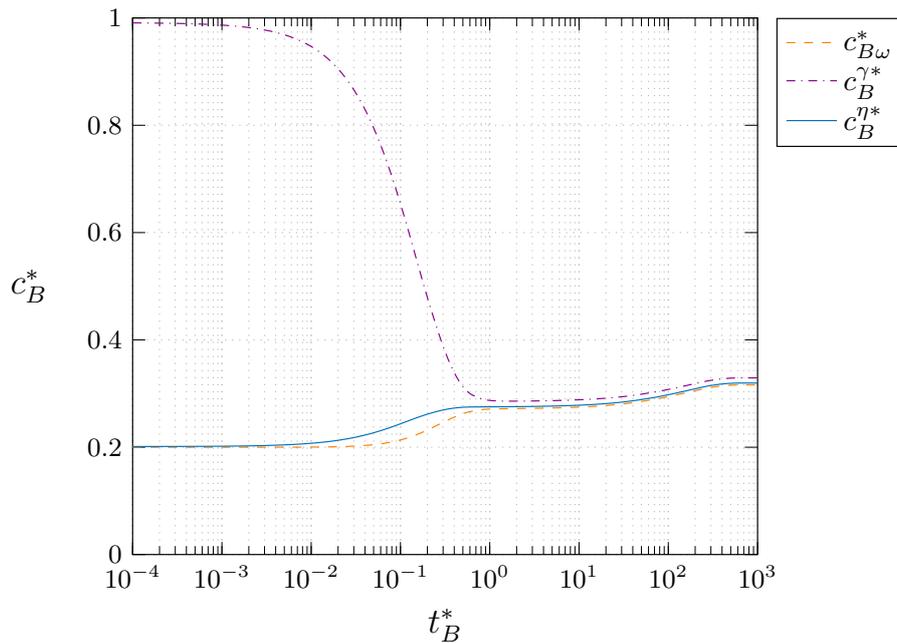


Figura 9.14. Concentración adimensional de la especie  $B$  en función del tiempo adimensional de operación.  $a_{B\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\gamma}^* = 0.7$ ,  $Bi_B = 5$ ,  $Bi_{\gamma\eta} = 1$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{P_B} = 0.28$ ,  $K_B^* = 1$ ,  $\mu_{P_B}^* = 0.08$ ,  $\alpha_{P_B}^* = 0.00257$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ ,  $\varepsilon_\gamma = 0.12$ ,  $\dot{Q}_d^* = 0.01$ . Condiciones iniciales:  $c_{B0}^{\gamma^*} = 1$ ,  $c_{B0}^{\eta^*} = 0.2$ ,  $c_{B\omega j0}^* = 0.2$ .

esto se determinan las siguientes propiedades:  $R_f = 5.5 \times 10^{-5} \text{ m}$  (Delgado y col., 2011; Wu y col., 2012),  $\mathcal{D}_{A\beta} = 1.21 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  (para el ácido acético en agua) y  $\mathcal{D}_{B\beta} = 2.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$  (para el oxígeno en agua) (Cussler, 2009). Utilizando los valores previos, y mediante las definiciones dadas en las secciones 7.6 y 8.3, se estiman los tiempos característicos para la difusión de ambas especies químicas en:  $t_{D_A} = 2.5 \text{ s}$  y  $t_{D_B} = 1.44 \text{ s}$  para la especie  $A$  y  $B$ , respectivamente. A continuación, se determina el tiempo a partir del cual se identifica el estado estacionario, de acuerdo con las Figuras 9.8 y 9.14, en  $t_A^* = 10$  y  $t_B^* = 1000$ , respectivamente para la especie  $A$  y  $B$ . De esta forma se estima que la concentración de AGCL promedio en la región líquida del tanque aerobio alcanzará el estado estacionario a los 25 s de operación, mientras que la concentración de oxígeno demora 24 min para llegar a este mismo estado. Esto indica que se debe comenzar la aireación del tanque 24 min antes de la alimentación de la corriente con grasas. De esta forma se asegura que la concentración de oxígeno en el tanque aerobio se encontrará al 30% de saturación durante toda la cinética de oxidación de AGCL. Este resultado corresponde a una aproximación, debido a que se utilizó como coeficiente de difusividad molecular para los AGCL al correspondiente para ácido acético. Sustituyendo este valor por uno para ácidos grasos de entre 12 y 18 carbonos (ver Tabla 2.2) proporcionará un resultado más exacto.

### 9.2.4 Distribución de tamaños de flóculo

Al igual que durante el análisis de los AGCL, es importante considerar en este punto del desarrollo la distribución de tamaños que tienen los flóculos, ya que esto puede afectar la tasa de consumo de oxígeno. Considerando la misma distribución de tamaños que para los AGCL se obtiene la Figura 9.15. A pesar de no observarse un cambio tan marcado sobre el consumo de oxígeno, a diferencia de con los AGCL, existe una diferencia en consumo de acuerdo con el tamaño del flóculo. Es posible notar que debido a la presencia de flóculos más pequeños (menores a  $55\mu\text{m}$  de radio), el consumo de oxígeno será en promedio menor con respecto a cuando no se considera la distribución de tamaños de flóculo.

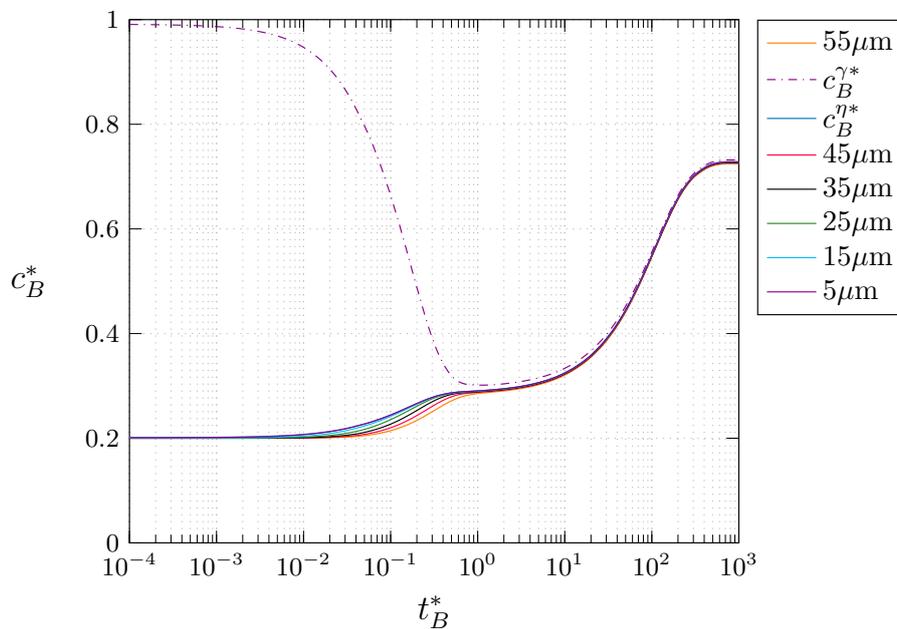


Figura 9.15. Concentración adimensional de la especie  $B$  para diferentes radios de flóculo.  $a_{B\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\gamma}^* = 0.7$ ,  $Bi_B = 5$ ,  $Bi_{\gamma\eta} = 1$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$ ,  $\varepsilon_{p_B} = 0.28$ ,  $K_B^* = 1$ ,  $\mu_{p_B}^* = 0.08$ ,  $\alpha_{p_B}^* = 0.00257$ ,  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ,  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ ,  $k = 0.25$ ,  $\varepsilon_\gamma = 0.12$ ,  $\dot{Q}_d^* = 0.01$ . Condiciones iniciales:  $c_{B0}^{\gamma*} = 1$ ,  $c_{B0}^{\eta*} = 0.2$ ,  $c_{B\omega j0}^* = 0.2$ .

## 9.3 Resumen del capítulo

En este capítulo se presentó la simulación numérica de las ecuaciones deducidas para el transporte de masa de AGCL y oxígeno. Basado en la literatura, y en un análisis de tamaño del efecto se delimitó el valor que los parámetros y números adimensionales de dichas ecuaciones pueden adoptar. Adicionalmente, se establecieron los parámetros adimensionales con mayor efecto sobre la oxidación de AGCL y consumo de oxígeno. Esto permitió modelar la dinámica de la

concentración adimensional de AGCL y oxígeno en el tanque aerobio.

Los parámetros determinantes para la oxidación de los AGCL son el área interfacial por unidad de volumen de los flóculos presentes en el sistema ( $a_{B\eta\omega}^*$ ), la proporción del volumen del flóculo que representa la matriz extracelular ( $\epsilon_e$ ) y la fracción volumétrica de las células que son capaces de oxidar AGCL con respecto a las que no ( $\epsilon_{PA}$ ). Esto refleja la importancia de la calidad del flóculo en la operación de biorreactores de membrana sumergida, donde la membrana se encuentra en un tanque distinto al de la oxidación. Flóculos grandes, con alto contenido celular viable y con microorganismos adaptados a altas concentraciones de G&A representarán la opción más viable para la oxidación eficiente de AGCL. Estos permiten reducir la carga del efluente del MBR a concentraciones por debajo del 20% de la concentración que se alimenta al tanque.

Para el caso del oxígeno, éste se vio limitado en su análisis por los resultados del análisis para AGCL. Sin embargo, fue posible identificar al flujo volumétrico de aire ( $\dot{Q}_d^*$ ) y la tasa máxima de consumo ( $\mu_{P_b}^*$ ) adimensionales como los parámetros que más influyen en el consumo de oxígeno. Cabe destacar que dada la importancia del oxígeno como último aceptor de electrones, éste debe ser suficiente para no limitar la oxidación de AGCL. Con el análisis presentado en este capítulo, se puede corroborar que con flujos de aire dentro de los reportados en la literatura de reactores a nivel industrial, y considerando a microorganismos con tasas de consumo de oxígeno reportadas, ésta especie química está presente en cantidades suficientes. Se observó que es posible suministrar suficiente oxígeno al tanque para mantener niveles por arriba del 20% de saturación en todo momento. Además, se revisó el efecto que tiene la distribución de tamaños de flóculo en el consumo de oxígeno. El análisis permite concluir que los flóculos más grandes son los que consumen mayor cantidad de esta especie química, por lo tanto, puede considerarse siempre el análisis de consumo de oxígeno utilizando como referencia al tamaño de flóculo más grande. De esta forma se cuenta con suficiente suministro para que no se limite el consumo de la fuente de carbono.

A partir del análisis llevado a cabo en este capítulo, se identificaron las mejores condiciones de diseño y operación para el tanque aerobio. Los parámetros de diseño son aquellos que se establecen previo a la operación del reactor, por lo que no pueden ser modificados una vez puesto en marcha el equipo. Por su parte, los parámetros de operación son aquellos que pueden ser modificados durante la biorreacción.

Con base en esta distinción, las mejores condiciones de diseño adimensionales para el tanque aerobio son: Grandes áreas interfaciales entre el líquido y el flóculo por unidad de volumen ( $a_{\eta\omega}^*$  y

$a_{B\eta\omega}^*$ ), con valores cercanos, pero por debajo, de uno. De forma similar, es recomendable contar con áreas interfaciales entre el líquido y la fase oleosa y entre el líquido y las burbujas de aire por unidad de volumen ( $a_{\eta\lambda}^*$  y  $a_{\eta\gamma}^*$ , respectivamente) cercanas, pero menores, a uno. Esto se puede interpretar como flóculos, micelas y burbujas, ya sea pequeñas y/o en gran cantidad. Los valores adimensionales exactos que generan mejores condiciones para las áreas interfaciales son:  $a_{\eta\omega}^* = a_{B\eta\omega}^* = 0.9$ ,  $a_{\eta\lambda}^* = 0.8$  y  $a_{\eta\gamma}^* = 0.7$ . En el tanque aerobio se desea una baja tasa hidrolítica, lo cual es determinado por el valor del módulo de Thiele y es deseable que se mantenga por debajo de uno. De acuerdo al análisis, el valor recomendado es  $\phi_{\lambda\eta}^2 = 0.15$ . Resulta importante mencionar que, si bien éste se considera un parámetro de diseño, como se comentó en los casos particulares de operación, es posible modificarlo momentáneamente mediante adición de enzimas hidrolíticas, si fuera el caso. En cuanto a la calidad de los flóculos a utilizar, es ventajoso operar con la presencia de la mayor fracción celular posible y aclimatarlos al crecimiento con contenidos de AGCL para tener altas tasas oxidativas de AGCL ( $\mu_{P_A}^*$  cercanas a 10) con bajas constantes de saturación ( $\alpha_{P_A}^* \leq 10^{-3}$ ). Es por ello que se recomiendan fracciones volumétricas para la matriz extracelular por debajo de 0.7 y fracciones volumétricas para las células que consumen AGCL lo más elevadas posible (limitada por la fracción de la matriz extracelular). Los valores utilizados en este trabajo corresponden a  $\mu_{P_A}^* = 9$ ,  $\alpha_{P_A}^* = 0.003$ ,  $\varepsilon_e = 0.7$  y  $\varepsilon_{P_A} = 0.25$ . Para el oxígeno, no hay limitación para la degradación de AGCL mientras la velocidad específica de consumo de este sustrato y la constante de saturación se encuentren en o por debajo de  $10^{-2}$ . En este estudio se utilizaron  $\mu_{P_B}^* = 0.08$  y  $\alpha_{P_B}^* = 0.00257$ . Debido a que se trata de un tanque aerobio, se espera que la fracción volumétrica de células que consumen oxígeno sea alta ( $\varepsilon_{P_B} = 0.28$  en este estudio), pudiéndose encontrar alejadas de cero y con límite superior dependiente de la fracción volumétrica que representa la matriz extracelular. Finalmente, la región líquida dentro del tanque debe representar la mayor parte del volumen total (establecida en este estudio como  $\varepsilon_\eta = 0.85$ ), por lo que la fracción volumétrica de aire debe ser minoritaria (establecida en  $\varepsilon_\gamma = 0.12$ ). Sin embargo, el cambio en la fracción de la región líquida no representa grandes cambios en la degradación de AGCL y consumo de oxígeno.

Mientras que las mejores condiciones de operación adimensionales para el tanque aerobio están dadas por: Flujos volumétricos de alimentación para el reactor bajos, del orden de  $10^{-5}$ . Como resultado de este trabajo se estableció  $\dot{Q}_e^* = 0.00003$ . Además, se desean tener bajas resistencias a la transferencia de masa entre la región líquida y los flóculos, tanto para los AGCL como para el oxígeno. Esto significa valores para el número de Biot mayores a uno, y de acuerdo al análisis

anterior se establecieron en  $Bi_A = 1$  y  $Bi_B = 5$ , respectivamente. Lo anterior se logra al mantener altas tasas de agitación mediante flujos volumétricos de aire elevados (del orden de  $10^{-2}$ ), utilizando en este trabajo  $\dot{Q}_d^* = 0.01$ . También es deseable que resistencias a la transferencia de masa entre las burbujas y la región líquida sean mínimas, dadas por números de Biot mayores a uno ( $Bi_{\gamma\eta} = 1$ ). A pesar de haberse obtenido un valor único como resultado de este estudio, tanto para parámetros de diseño y operación, esto no significa que no puedan oscilar alrededor de estas magnitudes al aplicarse experimentalmente a un sistema.

En este momento, es pertinente mencionar que las aportaciones cuantitativas de este trabajo se expresan a través de parámetros y números adimensionales. El valor específico dimensional para cada parámetro depende de la configuración y condiciones de operación del sistema que se esté estudiando. Es por lo tanto posible obtener valores dimensionales que satisfagan a lo encontrado en este análisis paramétrico al utilizarse las definiciones dadas en la sección 7.6 para el tanque aerobio. De esta forma, los parámetros y números adimensionales pueden ser utilizados para cualquier tipo de tanque aerobio que cumpla con las suposiciones del modelo detalladas en capítulos anteriores. Además, haciendo uso de los resultados obtenidos, es posible detectar con anticipación la sensibilidad del sistema bajo estudio ante cambios en los parámetros de operación. Esto sin mencionar que la solución del modelo permite conocer la dinámica de la concentración, en donde se identifican fases estables y fases con cambios drásticos. A su vez, con esto se pueden determinar tiempos de operación en los cuales es necesario un estricto control del reactor y poder predecir el tiempo en el cual el sistema llega al estado estacionario. Estos dos últimos puntos pueden ser utilizados para facilitar la toma de decisiones operativas en las PTAR.

Para poder ser aplicado, este modelo debe primero ser validado contra datos experimentales. Lo anterior debe realizarse mediante la comparación con un sistema experimental que cumpla con las suposiciones que involucra el modelo deducido aquí. A pesar de que el modelo proporciona más información de la que experimentalmente podría medirse, esto no impide que sea validado. De hecho, la mayor cantidad de información proporcionada da paso a profundizar en el entendimiento del sistema bajo estudio a un costo computacional razonable.

Los resultados anteriores representan, junto con el modelo matemático del tanque aerobio, la mitad de la contribución de este trabajo. La otra mitad corresponde al modelo matemático del tanque de membrana y el análisis correspondiente se presenta en el siguiente capítulo.



## 10. Análisis del tanque de membrana

### Preliminares

El objetivo de este capítulo es llevar a cabo la simulación numérica de los modelos que describen el transporte de masa y cantidad de movimiento en el tanque de membrana. Para cumplir con este objetivo, se programaron las ecuaciones adimensionales que describen el transporte de masa total, de cantidad de movimiento y de masa de la especie *A* en Comsol Multiphysics 5.5. Los pasos para la elaboración del programa se detallan en el Anexo C. La organización del capítulo es la siguiente: En primer lugar se lleva a cabo el análisis paramétrico de los modelos para el tanque de membrana. El análisis comienza con las ecuaciones de transporte de masa total y cantidad de movimiento, debido a que éstas gobiernan al flujo del fluido que transporta a la especie *A*. Este desarrollo se presenta en la sección 10.1. Posteriormente, se procede a realizar el análisis paramétrico del transporte de masa de la especie *A* en la sección 10.2, y a reportar los intervalos donde los parámetros pueden ser utilizados. Una vez concluidos los análisis paramétricos, se muestran los resultados para el modelo 3D del tanque de membrana, involucrando tanto al transporte de cantidad de movimiento como de masa, y que corresponden a las condiciones más favorables de transporte. Por último, se presenta un resumen de los resultados obtenidos.

## 10.1 Simulación numérica de la mecánica de fluidos

La mecánica de fluidos del tanque de membrana, a diferencia de en el tanque aerobio, resulta de un proceso de escalamiento a través de los diferentes niveles de escala que componen al medio efectivo, además de una ecuación que gobierna el transporte en la región líquida (región- $\eta$ ). El análisis de esta sección abarca la determinación del efecto que tienen los parámetros del modelo matemático sobre la velocidad del fluido, tanto en la región externa a los casetes de filtración, como dentro de los mismos. Como se puede notar en las ecuaciones (8.113), los principales parámetros que determinan la velocidad dentro de estos dos dominios son el coeficiente de permeabilidad aparente ( $\mathbf{H}^*$ ), el número de Reynolds ( $Re$ ) y la velocidad a la salida del permeado ( $\mathbf{v}_{efsup}^*$ ).

Para llevar a cabo la simulación numérica, la forma adimensional del coeficiente de permeabilidad aparente ( $\mathbf{H}^*$ ) fue estimada a través de la ecuación propuesta por Chai y *col.* (2011), donde considerando la corrección por la diferencia en las longitudes características de la celda unitaria y el casete de ultrafiltración se tiene que:

$$\mathbf{H}^* \left( \frac{\ell}{\ell_c} \right)^2 = \left( \frac{\ell}{\ell_c} \right)^2 \frac{1}{8\pi} \left[ -\ln(1 - \varepsilon_f) - \frac{3}{2} + 2(1 - \varepsilon_f) - \frac{(1 - \varepsilon_f)^2}{2} \right] \mathbf{I} \quad (10.1)$$

donde  $\varepsilon_f = \varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta + \varepsilon_\gamma$  y  $\ell$  es la longitud característica de la celda unitaria periódica. Debido a lo anterior, la predicción de  $\mathbf{H}^*$  depende de la fracción volumétrica del fluido total en el casete de ultrafiltración.

Los modelos matemáticos correspondientes a las regiones  $\eta$  y  $\zeta$  se resolvieron numéricamente usando el módulo de flujo laminar para la primera y el módulo de la ecuación de Darcy-Brinkman, ya programados en Comsol-Multiphysics. La razón por la cual se optó por utilizar al módulo de Darcy-Brinkman, en lugar del módulo de Darcy se debe a que la velocidad promedio dentro de los casetes de ultrafiltración sufre cambios espaciales cerca de sus fronteras, los cuales no pueden ser predichos usando simplemente a la ley de Darcy. En otras palabras, el modelo de tipo Darcy deducido en el capítulo 8, sección 8.1, es aplicable únicamente en el *seno* de cada casete de ultrafiltración, es decir, suficientemente lejos de las fronteras macroscópicas. El uso del modelo de Brinkman es solo una de muchas otras alternativas de modelado y merece una exploración más profunda a la dedicada aquí y por tanto se lista más adelante como una prospectiva. Como primera aproximación, y para facilitar la simulación numérica, no se consideran las resistencias a la transferencia de cantidad de movimiento entre la región- $\eta$  y la región- $\zeta$ . Esto provoca que los

resultados mostrados a continuación expresen el máximo valor que puede adoptar el transporte de masa convectivo con respecto al transporte de masa total. Más aún, existe una falta de consenso sobre la mejor alternativa para la definición *a priori* del parámetro  $\alpha$  del modelo de Beavers-Joseph, por lo que es ventajosa la reducción de este grado de libertad que, además, facilita la simulación numérica. Sin embargo, lo anterior no representa un impedimento para el análisis de los mecanismos de transporte del tanque de membrana, y resulta no tener mayor repercusión sobre el transporte de masa de la especie dentro de los casetes de ultrafiltración, como muestran los resultados.

Bajo las condiciones de modelado descritas arriba, se llevaron a cabo una serie de simulaciones numéricas para distintas condiciones de flujo. Los resultados de estas simulaciones no se presentan aquí para delimitar la extensión del documento. Debido a que la variable de mayor importancia en este análisis es la concentración de AGCL en el permeado, no es posible determinar las condiciones más favorables de operación sin antes haber determinado el efecto que tienen los diferentes parámetros sobre esta variable respuesta. El presente desarrollo debe, por tanto, ser complementado con el transporte de masa para la especie A, el cual se desarrolla en la siguiente sección.

Como resultado del análisis de esta sección, se identificó que, conforme aumenta la fracción volumétrica del fluido total en el casete de filtración, la velocidad del fluido en esta región presenta una ligera tendencia a la baja. Esto se da principalmente a la salida del permeado de los casetes de ultrafiltración, y no repercute sobre la velocidad fuera de los mismos.

La magnitud del número de Reynolds resulta importante ya que de ésta depende no sólo el nivel de turbulencia dentro del tanque y de las membranas, sino también el mecanismo de transporte de masa de los AGCL. Dado que en el sistema bajo estudio es indeseable la operación bajo un régimen predominantemente convectivo para la transferencia de masa, es conveniente restringir el análisis a valores del número de Reynolds que correspondan al régimen laminar o incluso reptante. A fin de limitar el intervalo de simulación para el Reynolds, se analizaron valores desde el orden de magnitud de  $10^{-3}$  y hasta  $10^2$ . Los resultados indican que se podrá realizar la simulación siempre y cuando el número de Reynolds para la región fluida externa a los casetes ( $Re$ ) se encuentre por debajo de  $10^2$ , y para Reynolds dentro de los casetes ( $Re_c$ ) por debajo de  $10^1$ . Además de estas limitaciones, el número de Reynolds se ve limitado por el valor que adquiera el número de Péclet ( $Pe$ ), debido a su relación a través del número de Schmidt definido anteriormente. Realizando el cálculo, se identifica que  $Sc \approx 1000$ , por lo que este factor se utilizará para determinar el valor del número de Reynolds de la región líquida a partir del número de Péclet. Además, se supone

razonable determinar la siguiente proporción entre los dos números de Reynolds involucrados en este modelo matemático:  $Re_c = \frac{Re}{2}$ . Lo anterior se establece debido a que dentro de los casetes, el régimen de flujo debe ser a lo más la mitad del experimentado en el fluido libre debido a la presencia de las fibras en los módulos de los casetes de ultrafiltración.

Adicionalmente, es importante hacer notar que, operando a flujos con Reynolds bajos, es posible simplificar la complejidad del análisis paramétrico. Todos los modelos, con excepción del que gobierna al fluido al exterior de los casetes (ecuación de Navier-Stokes), son ecuaciones lineales. Sin embargo, es razonable, para flujos reptantes, despreciar la contribución por esfuerzos inerciales, la cual constituye el único término no lineal presente en los modelos del tanque de membrana. Esto se puede aseverar para este modelo del tanque de membrana, debido al resultado obtenido del análisis comparativo entre el módulo para flujo reptante y el módulo para flujo laminar de Comsol Multiphysics (resultados no mostrados por brevedad). Se llevó a cabo la medición de la magnitud de la velocidad en diferentes puntos del reactor: zonas cercanas al puerto de alimentación, entre los casetes de ultrafiltración, y cerca de las superficies laterales del tanque. Además, se evaluaron los patrones de flujo definidos por las líneas de corriente de la velocidad resultante de ambas soluciones numéricas, apreciando así fácilmente la similitud entre las predicciones. Esta concordancia se observó acentuada en aquellas porciones del sistema donde el transporte es mayoritariamente convectivo para la especie química. Esto resulta importante porque, dicho transporte es eclipsado por el transporte de masa difusivo en el resto del tanque. En dichas zonas ya no guarda importancia el menor grado de similitud entre los resultados obtenidos porque la convección no repercute de forma importante en el transporte de masa de la especie A. Con base en lo anterior, puede concluirse que el flujo dentro del tanque de membrana es predominantemente reptante y que por lo tanto puede utilizarse tanto el módulo de flujo reptante como el de flujo laminar para estas simulaciones numéricas. Sin embargo, se decide utilizar el módulo de flujo laminar para evitar la pérdida de detalles caprichosos en la trayectoria del fluido, ya que éstos pueden ser subestimados por el módulo de flujo reptante. Sin embargo, la conclusión de que el flujo es mayoritariamente reptante tiene una consecuencia relevante en el análisis paramétrico de este capítulo. Ya que este modelo es lineal, se deduce que todas las ecuaciones que gobiernan el transporte tanto dentro como fuera del casete de ultrafiltración pueden ser analizados como modelos lineales. Como se explicó en la sección 9.1, la linealidad de los modelos permite analizar cada parámetro por separado y sumar las salidas correspondientes, debido al principio de superposición (Gray y Gray, 2017).

La velocidad a la salida de los casetes, a diferencia de la fracción volumétrica del fluido total, tiene repercusiones importantes sobre la velocidad del fluido dentro del casete. Un incremento en esta velocidad, conlleva a un incremento en la velocidad promedio en el casete, pero no altera los patrones de flujo. Además, la velocidad de salida impactará en el volumen del tanque; si ésta es menor que la velocidad de alimentación, el tanque incrementará su volumen y se corre el riesgo de desbordamientos; si la velocidad a la salida es mayor que la de entrada, entonces el tanque podría vaciarse y dejar expuestas a las membranas. Ambas situaciones son indeseables; sin embargo, esta simulación no contempla el cambio de volumen del tanque por tratarse de una simplificación de este proceso. A pesar de esto, es razonable suponer que éste detalle operacional será cuidado durante la experimentación y no es necesario incluirlo en el proceso de simulado ni en el análisis correspondiente desarrollado a continuación.

## 10.2 Simulación numérica del transporte de masa de la especie A

Una vez realizada la simulación numérica del transporte de masa total y de la cantidad de movimiento, se puede proceder a analizar la incorporación del transporte de masa a la simulación. Los detalles de este programa se reportan en el Anexo C, e incorporan la simulación de todos los transportes del tanque de membrana. Es importante mencionar que los resultados mostrados a continuación fueron obtenidos utilizando una malla computacional calibrada para dinámica de fluidos con 72,552 elementos. Esta malla, comparada con mallas más finas (145,055 elementos), genera menos del 2% de error en los resultados, y se consideran resultados exactos. Mayor cantidad de elementos en la malla genera errores cada vez más pequeños, pero demandando mayor poder y tiempo de cómputo, por lo cual no fueron considerados en este trabajo.

Se debe mencionar que los valores adimensionales para el coeficiente de difusividad efectiva ( $D^*$ ) y el tensor de dispersión efectiva ( $D_{ef}$ ) de la especie A fueron estimados a partir del Modelo de Rayleigh (1892). Dicho modelo es aplicable a geometrías cilíndricas que no se tocan (caso de las fibras huecas del casete de ultrafiltración) y predice los valores a partir de la relación difusividad efectiva/difusividad molecular de la especie en la escala inferior anterior. Es por ello que se llevó a cabo en primer lugar la predicción del coeficiente de difusividad efectiva de la siguiente manera:

$$k_1 = \frac{D^*}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \frac{1}{2 - \varepsilon_{\beta\sigma}} \quad (10.2)$$

donde  $\varepsilon_{\beta\sigma}$  es la porosidad de la región- $\sigma$  que compone a las fibras huecas. Posteriormente, este valor se utiliza para la estimación del tensor de dispersión efectiva de acuerdo con la siguiente expresión:

$$(\varepsilon_{\sigma} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\eta}) \frac{D_{ef}}{\mathcal{D}_{A\beta}} = \frac{2k_1 - (\varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\eta})(k_1 - 1)}{2 + (\varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\eta})(k_1 - 1)} + (\varepsilon_{\sigma} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\eta})0.07 Pe^{1.7} \quad (10.3)$$

donde el segundo término de la ecuación anterior compone un factor de corrección (Whitaker, 1999), el cual se incorpora debido a la convección existente en el sistema. La razón por la cual este factor de corrección no está presente en la ecuación (10.2), es que puede ser despreciado por ser mucho menor que el aporte por convección en la escala de la ecuación (10.3). Esto se le atribuye a la disparidad de longitudes características de ambas escalas, ya que ésta repercute en la magnitud del número de Péclet debido a la siguiente relación:

$$Pe_{\beta\sigma} = \frac{\ell_{\beta\sigma}}{\ell_c} Pe \quad (10.4)$$

donde  $Pe_{\beta\sigma}$  es el número de Péclet a nivel de poro,  $Pe$  es el número de Péclet a nivel de medio efectivo y  $\ell_{\beta\sigma}$  es la longitud característica a escala de poro. Además, se sabe que  $\ell_{\beta\sigma} \ll \ell_c$ .

En la Figura 10.1 se grafica la dinámica de la especie A en el tanque de membrana en función del tiempo. Este resultado se obtiene a partir de suponer que la concentración de la región líquida a la entrada es la misma que la concentración promedio en la región líquida del tanque aerobio ( $c_A^{\eta*} = 0.17$ ), y suponiendo que la concentración inicial de la especie A en todas las regiones del tanque de membrana es cero. Se observan cuatro concentraciones diferentes,  $c_{A\sigma}^*$  es la concentración promedio de la especie A en la región líquida del tanque de membrana, mientras que las otras tres corresponden a la concentración promedio de la especie A en las superficies de salida de cada uno de los casetes de ultrafiltración que componen al sistema. Conforme se alimenta el tanque de membrana, a partir del efluente del tanque aerobio, la concentración promedio en el medio líquido y a la salida de los casetes se ve incrementada, hasta alcanzar el equilibrio. El casete 1 se localiza en la parte más próxima, el casete 2 se localiza en la parte intermedia y el casete 3 está posicionado en la parte más distal del tanque de membrana, con respecto a la abertura donde éste se alimenta. Debido a su proximidad con la alimentación del tanque, el casete 1 se satura y alcanza el equilibrio más rápidamente con respecto a los casetes 2 y 3. Además, la concentración de la especie

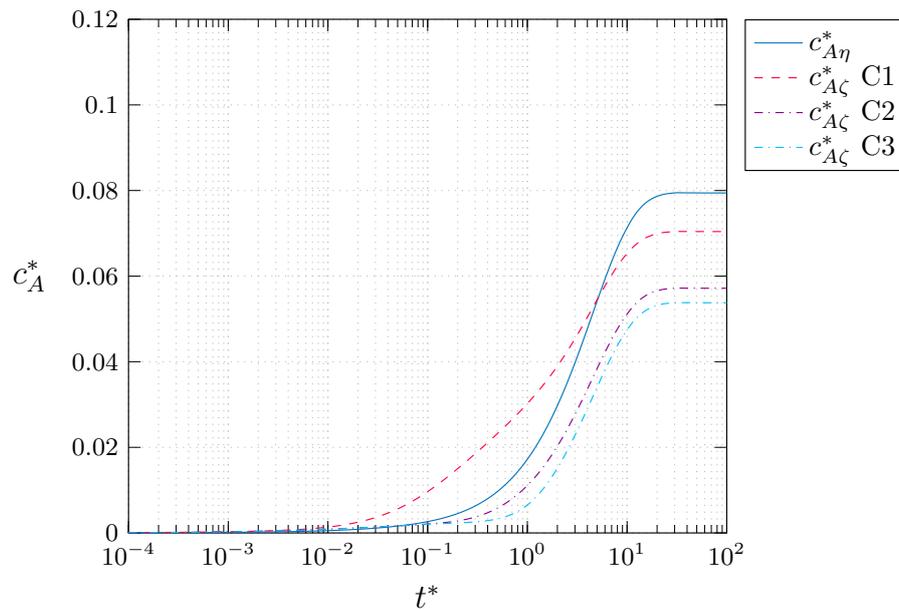


Figura 10.1. Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación en el tanque de membrana.  $Bi_{\eta\zeta} = 1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 1$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $\varepsilon_l = 0.3$ ,  $\varepsilon_f = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ . C1=casete 1, C2=casete 2, C3=casete 3.

A en el permeado de cada casete en el equilibrio también presenta diferencias de acuerdo con su localización. Más aún, durante parte del tiempo de operación, el casete 1 acumula mayor cantidad de masa con respecto al resto del sistema. Esto último puede ser atribuido a que la especie A que entra a través de la alimentación queda retenida por este primer casete, impidiendo su distribución homogénea a lo largo de todo el tanque. Al encontrarse saturado de la especie química, el medio filtrante del casete 1 cede y permite el paso de cierta cantidad de especie A hacia el permeado. A pesar de esto, el efecto de la cercanía con el punto de alimentación se ve aminorado con el transcurso del tiempo, siendo la concentración a la salida del casete 1, durante el estado estacionario, menor que la concentración promedio en la región líquida. Para esta configuración particular, y bajo las condiciones dadas, la concentración en equilibrio para la región líquida alcanza un valor adimensional de 0.08; para el casete 1, 0.07; para el casete 2, 0.057; y para el casete 3, 0.054.

### 10.3 Delimitación de los parámetros en el modelo

El valor para la concentración en estado estacionario para cada región depende del valor que se asigne a cada uno de los parámetros y números adimensionales incluidos en el modelo matemático. El desarrollo de esta sección es similar al del tanque aerobio, y consiste en el análisis de los

parámetros y números adimensionales que incluye el modelo matemático, partiendo de valores de referencia y con el fin de encontrar intervalos en donde sean válidos para el sistema bajo estudio. En la literatura se pueden encontrar intervalos para estos estos grados de libertad; sin embargo, es necesario refinar el límite para los valores que adoptan estos y analizar el efecto que ejercen sobre la variable respuesta. Esto sirve para establecer las magnitudes que satisfagan el fenómeno físico a modelar con las ecuaciones previamente deducidas.

El primer acercamiento se realiza con el número de Biot entre la región líquida y el medio efectivo ( $Bi_{\eta\zeta}$ ) que describe la relación entre el transporte por difusión dentro de los casetes y el transporte por convección entre la región líquida externa a los casetes de ultrafiltración y estos. Al incrementar el número de Biot disminuyen las resistencias interfaciales a la transferencia de masa en esta frontera. Como se puede observar en la Figura 10.2, incrementar el Biot de 0.1 a 1 provoca una disminución en la concentración promedio de la región líquida en el tanque y un incremento en la concentración del permeado de los tres casetes de ultrafiltración. El límite inferior presentado (0.1) se establece de acuerdo a la literatura, mientras que el límite superior (1) se establece a través de este análisis. Valores por arriba de 1 ya no generan cambios importantes en las concentraciones graficadas. Es decir, que conforme menor sea el número de Biot, menor cantidad de AGLC será transportado al medio efectivo que representa a cada casete de ultrafiltración. Esto podría repercutir en la saturación con AGLC de las fibras de la membrana de ultrafiltración, posible acumulación en ellas y mayor proporción de AGLC atravesando el medio poroso hasta el permeado.

Durante este tipo de procesos de filtración, se prefiere tener bajas tasas de transferencia de masa por convección. Esto es con el fin de retener en el tanque a la mayor cantidad de AGCL, entre otros componentes de las aguas residuales, que no se desea sean capaces de atravesar hasta el permeado. Debido a que el número de Biot depende directamente del coeficiente de transferencia interfacial de transferencia de masa, si el coeficiente es bajo, el número de Biot también lo será. Por esta razón, en este caso particular, se requieren números de Biot bajos para representar de mejor manera al fenómeno físico.

De forma similar se analiza el número de Biot presente entre el casete de ultrafiltración y el permeado que es extraído del tanque de membrana. A diferencia de la frontera del casete con el líquido del tanque, aquí lo deseable es que no se queden los AGCL retenidos en las fibras huecas, sino que toda la especie que haya atravesado hacia el haz de las fibras sea transportada fuera del tanque. Una acumulación en esta sección del permeado puede representar ensuciamiento y

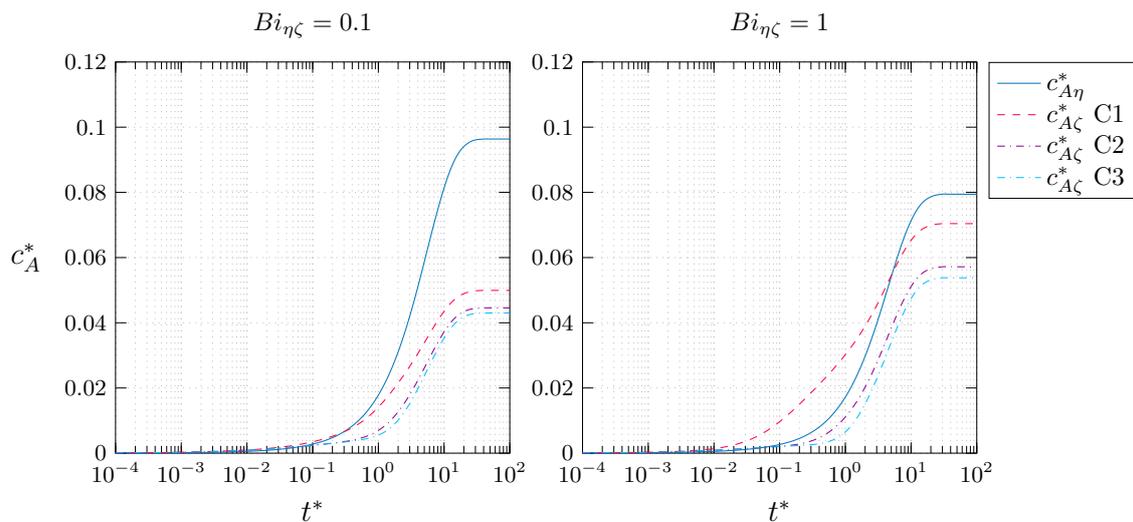


Figura 10.2. Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación en el tanque de membrana.  $Bi_{\zeta o} = 1$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $\varepsilon_l = 0.3$ ,  $\varepsilon_f = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ . C1=casete 1, C2=casete 2, C3=casete 3.

obstrucción de las fibras en su sección interna, y el subsecuente impedimento para continuar con el proceso de filtración. Como se observa en la Figura 10.3, un incremento en el número de Biot genera que la concentración de AGCL en el permeado de cada casete disminuya. Por esta razón, altos valores de Biot son preferibles. Sin embargo, una magnitud mayor a 7 ya no presenta cambios importantes sobre las concentraciones de AGCL; además, incrementar el número de Biot requiere de un aumento en el nivel de agitación de esta sección del sistema, lo cual requeriría mayores tasas de aireación. Por las razones antes descritas, se concluye que números de Biot elevados en esta frontera son los que permiten aproximar el modelo matemático a las condiciones operativas deseadas durante la operación de un MBR.

Las magnitudes que adopten estos dos números de Biot, representan físicamente la capacidad retentiva de la membrana de ultrafiltración. Esto puede estar definido por las características hidrófobas o hidrófilas del material que las compone, o del tamaño de poro que posean. Sin embargo, también existen factores como el ensuciamiento de la membrana que pueden repercutir en obtener resistencias altas a la transferencia de masa. Todo esto debe ser tomado en cuenta para la interpretación del número de Biot.

El número de Péclet es el tercer número adimensional que tiene un efecto marcado sobre la concentración de la especie A en el permeado de los casetes de ultrafiltración. Este número adimensional, depende de la velocidad del fluido, de la longitud característica y de la difusividad

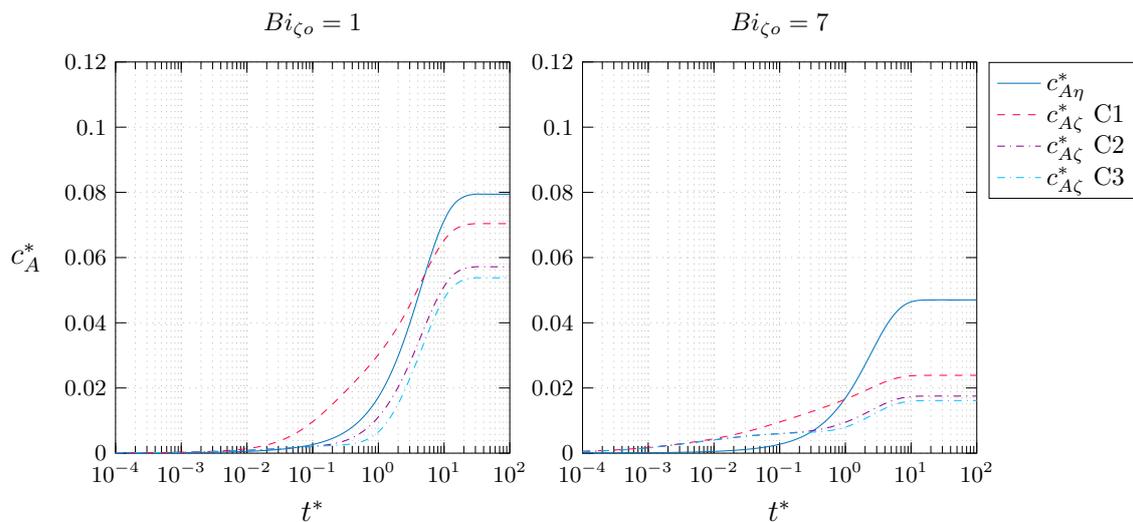


Figura 10.3. Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación en el tanque de membrana.  $Bi_{\eta\zeta} = 1$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $\varepsilon_l = 0.3$ ,  $\varepsilon_f = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ . C1=casete 1, C2=casete 2, C3=casete 3.

de la especie química; sin embargo, la longitud característica y la difusividad se consideran constantes, por lo que únicamente la velocidad del fluido generará cambios en el número de Péclet. A velocidades más bajas del fluido, debido en este caso a una menor tasa de aireación, disminuirá el número de Péclet. Si, por el contrario, la velocidad aumenta, este número adimensional incrementará también. El número de Péclet, al disminuir, provoca a su vez una disminución de la concentración adimensional, tanto en la región externa a los casetes como en el medio efectivo y a la salida del mismo. La causa es la menor movilización del fluido que transporta a los AGCL. Este efecto puede ser observado en la Figura 10.4, la cual grafica los límites del intervalo establecido para este número adimensional. Valores por debajo de 0.01 no se encuentran reportados en la literatura, por lo tanto este corresponde al límite inferior. El límite superior para el número de Péclet se estableció en 3, esto debido a que por arriba de este valor ya no es posible notar cambios importantes en las concentraciones en estado estacionario.

Finalmente, se analizó el efecto de las fracciones volumétricas sobre la concentración en el permeado de los tres casetes de ultrafiltración. No fue posible notar efectos grandes de estos parámetros sobre la variable respuesta, es por esto que no se muestran las gráficas con las variaciones de los parámetros para delimitar la extensión del documento.

A través del análisis anterior y de una revisión bibliográfica, se establecen los intervalos para los parámetros y números adimensionales, esto se muestra en la Tabla 10.1.

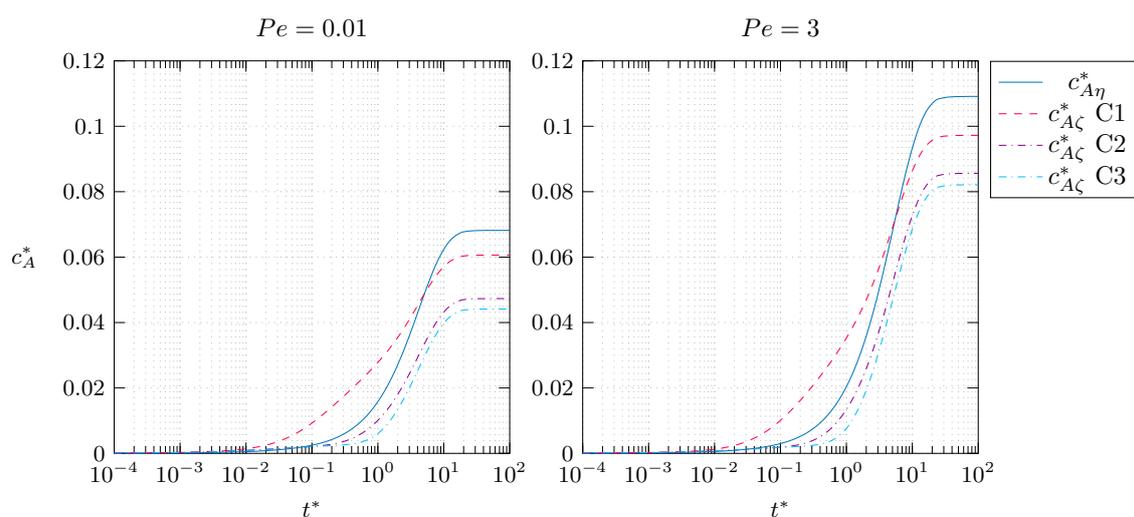


Figura 10.4. Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación en el tanque de membrana.  $Bi_{\eta\zeta} = 1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $\varepsilon_l = 0.3$ ,  $\varepsilon_f = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ . C1=casete 1, C2=casete 2, C3=casete 3.

Tabla 10.1. Intervalo de validez de los parámetros.

Parámetro	Min	Max	Referencias
$\varepsilon_{\beta\sigma}$	0.6	0.9	Zheng y col. (2006); Farahani y col. (2015)
$Pe$	0.01	3	Ding y col. (2013); Skoneczny y Cioch (2018)
$Bi_{\eta\zeta}$	0.1	1	Valdés-Parada y col. (2005)
$Bi_{\zeta o}$	1	7	Valdés-Parada y col. (2005)
$\varepsilon_f$	0.4	0.85	
$\varepsilon_{\sigma}$	0.1	$1 - \varepsilon_f$	
$\varepsilon_{\gamma}$	0.1	1	
$\varepsilon_l$	0.1	$1 - \varepsilon_{\sigma} - \varepsilon_{\gamma}$	
$Re$	$10^{-3}$	$< 10^2$	Limitado por el $Pe$
$Re_c$	$10^{-3}$	$< 10^1$	Limitado por el $Re$
$c_{A\eta e}^*$		0.17	Limitado por el tanque aerobio
$c_{Ao}^*$		$< 0.1$	Nakhla y col. (2003); Liu y col. (2004b) Kurian y col. (2006); Acharya y col. (2006c)

### 10.3.1 Condiciones finales para la simulación

Después de haber analizado los parámetros y números adimensionales involucrados en el modelo matemático, es posible seleccionar los valores que generen una mejor representación del sistema físico que se modela. A diferencia de en el tanque aerobio, aquí no se lleva a cabo un estudio

del tamaño del efecto, debido a que son pocos los parámetros que verdaderamente contribuyen a un incremento o decremento de la concentración a la salida del tanque. El número de Biot entre el líquido al exterior del casete y el casete tiene un efecto positivo sobre la variable respuesta, es decir, conforme incrementa este número de Biot, aumenta la concentración en el permeado. De forma contraria, el número de Biot entre el casete y el permeado fuera del tanque tiene un efecto negativo, disminuyendo la concentración adimensional de los AGCL en el permeado. El número de Pécelet, por su parte, tiene un efecto positivo; éste debe ser pequeño para favorecer la retención de los AGCL en el tanque y evitar así que salgan por el permeado. Una vez dicho lo anterior, se presenta en la Figura 10.5 la dinámica de la concentración promedio adimensional de los AGCL en diferentes regiones del sistema para los valores de los parámetros listados en la Tabla 10.1. Como se puede observar, una vez iniciada la alimentación del tanque con el efluente del tanque aerobio, la concentración promedio adimensional a la salida de cada uno de los casetes de ultrafiltración comienza a aumentar. Dicho aumento cesa a partir del tiempo 10 adimensional y alcanza el estado estacionario antes del tiempo 100. Por su parte, la concentración adimensional en la región líquida al exterior de los casetes permanece muy cercana a cero hasta que la concentración en los medios efectivos se encuentra cercana a su concentración en estado estacionario; sin embargo, la concentración se dispara entre los tiempos 0.1 y 10, hasta alcanzar la concentración en estado estacionario. Las concentraciones finales adimensionales a la salida de los casetes son muy similares y se encuentran alrededor de 0.015, mientras que la concentración adimensional fuera de ellos es de 0.08.

#### 10.4 Modelo 3D del tanque de membrana

En esta sección se muestran los resultados de las líneas de corriente de la velocidad, flux total y de la concentración de AGCL. Los resultados aquí reportados se encuentran acoplados en una misma simulación, que corresponde al Anexo C. Este análisis permite completar las observaciones obtenidas a partir del estudio paramétrico del modelo del tanque de membrana. La mecánica de fluidos se resolvió de forma estacionaria; sin embargo, el transporte de masa de la especie química se evaluó a lo largo del tiempo. Se presentan a continuación resultados para el flux total y el gradiente de concentración a tres tiempos representativos, que permiten explicar los fenómenos de transporte de masa que tienen lugar en el sistema. Los tiempos a los cuales se presentan resultados corresponden con las flechas rojas mostradas en la Figura 10.5.

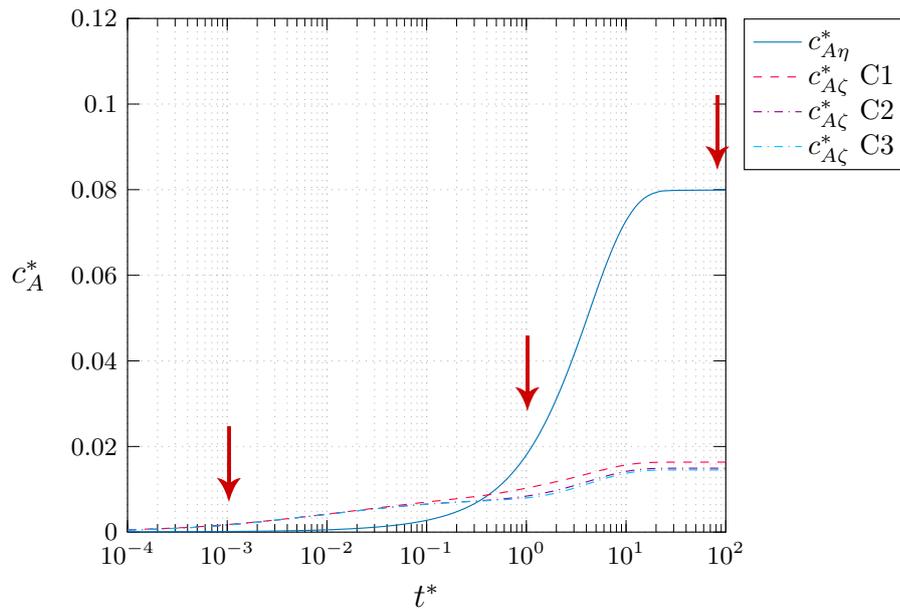


Figura 10.5. Dinámica de la concentración adimensional de la especie A en función del tiempo adimensional de operación en el tanque de membrana.  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $\varepsilon_l = 0.3$ ,  $\varepsilon_f = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{Ae}^{\zeta*} = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ . C1=casete 1, C2=casete 2, C3=casete 3. Las flechas rojas indican los tiempos a los cuales se muestran resultados para la simulación 3D.

En la Figura 10.6 se observan las líneas de corriente de la velocidad del fluido dentro del tanque de membrana. Es posible notar mayor velocidad a la alimentación del tanque, siendo su magnitud adimensional la máxima (igual a 1). Una vez que el fluido entra al tanque y se aleja del punto de alimentación, la velocidad disminuye. Las líneas de corriente de la velocidad evidencian dos principales patrones: uno de estos de forma descendente, que moviliza al fluido de la superficie del tanque hacia la parte media-alta de los casetes de filtración; mientras que otro presenta movilización desde la alimentación y hasta la parte distal del tanque, para posteriormente dirigirse a los casetes. Así también, se observa una corriente de fluido que se desplaza por debajo de los tres casetes de forma transversal. Estas líneas de corriente al interceptar la pared posterior del tanque, crean un flujo ascendente en toda la parte posterior del mismo. Las líneas de corriente antes mencionadas, eventualmente ingresan a los casetes a través de todas sus superficies laterales.

De forma similar se observan líneas de corriente de la velocidad adimensional del fluido dentro de los casetes de ultrafiltración en la Figura 10.7. El patrón observado en los tres casetes es similar, especialmente la aceleración del fluido en la parte superior de los mismos. Esta aceleración se debe a la presión de vacío ejercida en el permeado durante el proceso de filtración, y que, a la salida de las fibras huecas produce un cambio más notorio en la velocidad del fluido. Debido a esta diferencia

de presión, en todo momento el patrón de flujo de los casetes es ascendente.

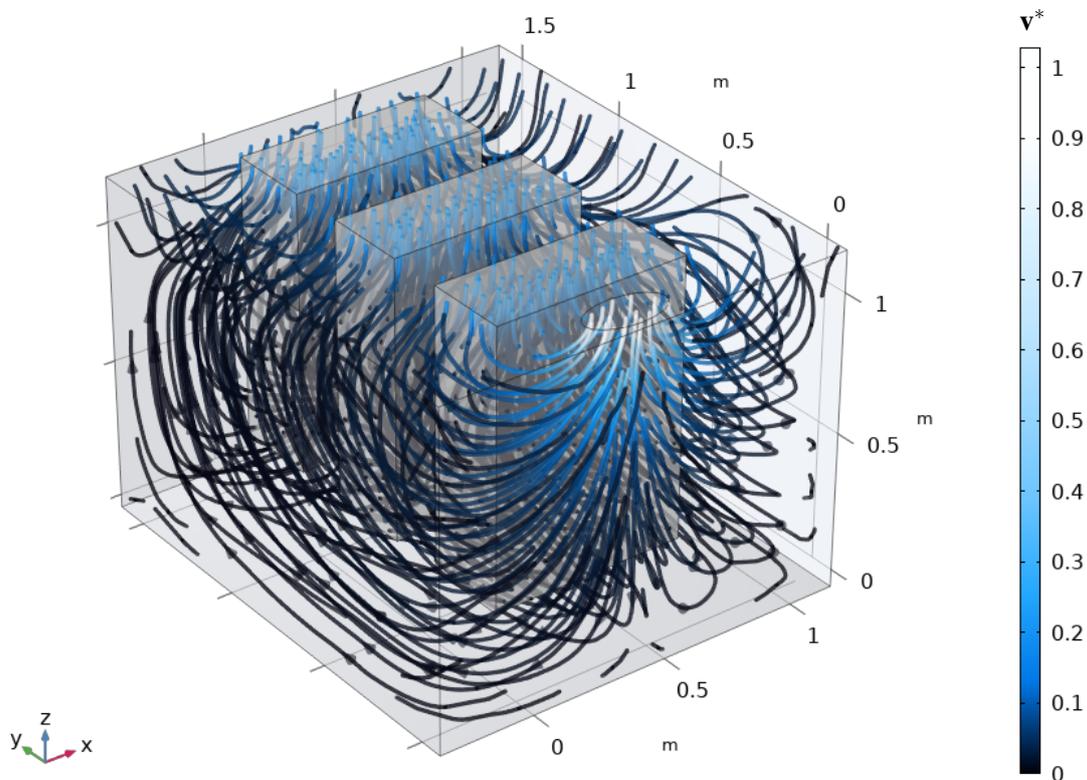


Figura 10.6. Líneas de corriente de la velocidad adimensional dentro del tanque de membrana.  $Re = 1 \times 10^{-3}$ ,  $Re_c = 5 \times 10^{-4}$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ .

### 10.4.1 Tiempos cortos de operación

Las figuras de esta sección fueron obtenidas al tiempo adimensional 0.001. Debido a que la simulación de este tanque supone concentración inicial de AGCL de cero, a tiempos cortos de operación lo que se observa es el desarrollo de las líneas de corriente conforme se alimenta a la especie química. En la Figura 10.8 se aprecian líneas de corriente para el flux total, las cuales, se encuentran desordenadas en la mayor parte del líquido circundante a los casetes. En la zona cercana al puerto de alimentación, y debido a la mayor concentración de AGCL presente, comienza a incrementar el flux total y a desarrollar un patrón distinguible. El valor máximo que adquiere el flux total adimensional es de 0.17 y se localiza justo a la alimentación del tanque, donde la concentración de AGCL es máxima.

Dentro de los casetes, el desarrollo de las corrientes de flux total tampoco son identificables. Esto se observa en la Figura 10.9, donde además, la magnitud del flux es del orden de  $10^{-4}$  en

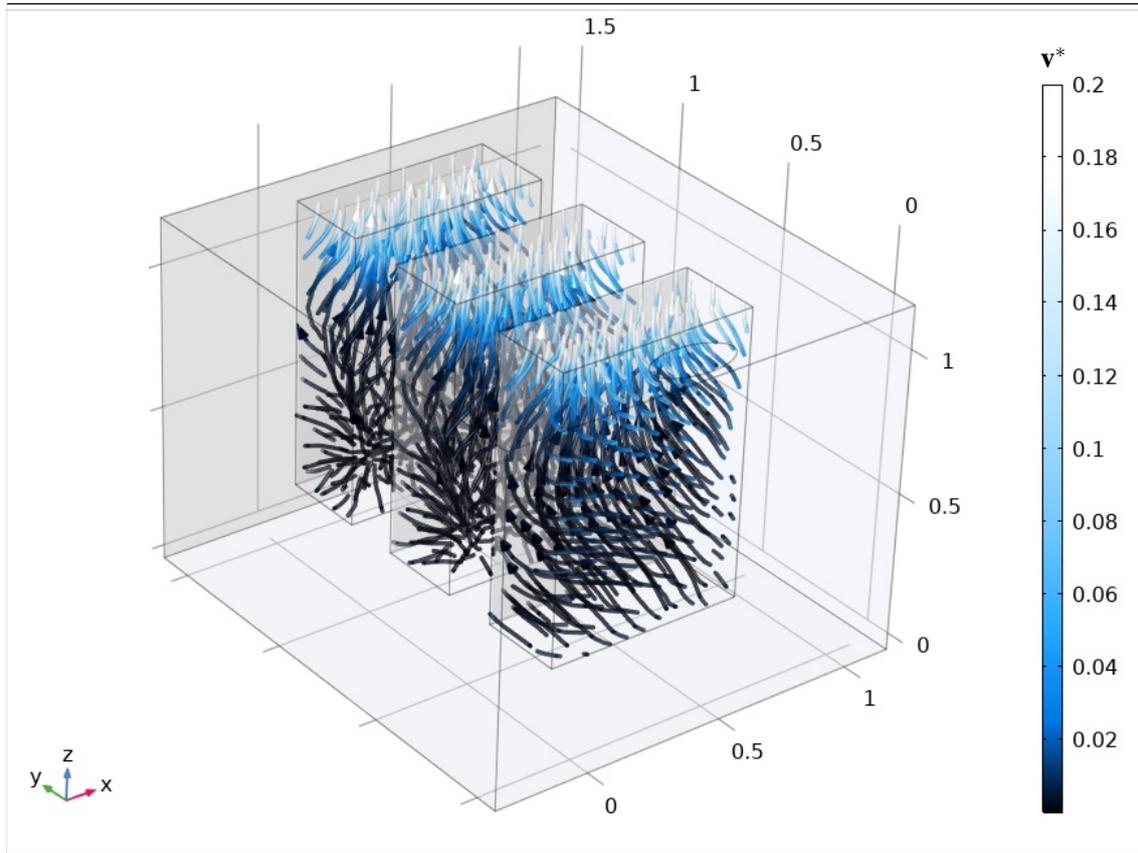


Figura 10.7. Líneas de corriente de la velocidad adimensional dentro de los casetes de ultrafiltración.  $Re = 1 \times 10^{-3}$ ,  $Re_c = 5 \times 10^{-4}$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ .

la mayor parte de los casetes. Únicamente en la zona más próxima de estos con la superficie del tanque se puede notar un incremento de un orden de magnitud sobre el flux total de masa.

Adicional a este resultado, se realizó un análisis por componente del flux difusivo. Las gráficas de estos resultados no se muestran por cuestiones de brevedad; sin embargo, complementan la descripción obtenida a partir de las figuras para el flux total. A cortos tiempos de operación, el transporte de masa dentro de los casetes es mayoritariamente difusivo en las tres componentes ( $x$ ,  $y$  y  $z$ ). En  $x$  y  $y$  el transporte por difusión representa entre el 98 y 100% del transporte total. Sólo en la zona más cercana al puerto de alimentación es posible notar alrededor del 5% del transporte que no es explicado por fenómenos difusivos, lo cual se le atribuye a la convección. Es importante recordar que el fluido sufre una aceleración debida a la presión de vacío ejercida por la bomba que extrae el permeado de los casetes de ultrafiltración. Esta diferencia de presión repercute sobre la componente  $z$  del flux difusivo, incrementando la proporción de transporte debido a la convección. Aquí se identificaron zonas en la sección alta de los casetes, donde la proporción del transporte por difusión puede ser, en su valor más bajo, del 96%.

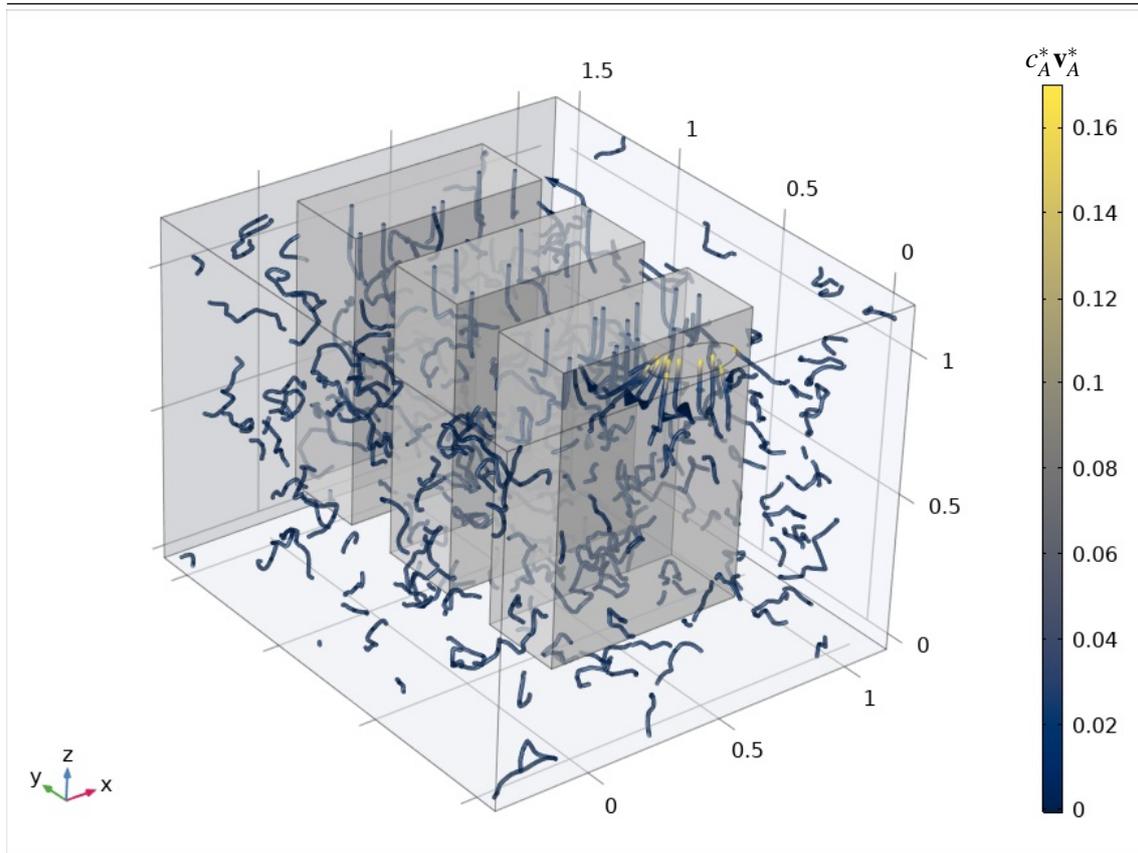


Figura 10.8. Líneas de corriente del flujo total dentro del tanque de membrana,  $t^* = 0.001$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

La concentración adimensional de AGCL a estos tiempos de operación es cercana a cero en todo el tanque, como se observa en las Figuras 10.10 y 10.11. Únicamente en la zona circundante al puerto de alimentación se identifican concentraciones adimensionales de AGCL de hasta 0.17, lo cual corresponde con la concentración a la salida del tanque aerobio. El ligero incremento en la concentración adimensional de AGCL en la zona superior de los casetes se atribuye a la posición del puerto de alimentación. Debido a que las concentraciones más elevadas de AGCL se localizan inicialmente en la superficie del tanque, la región de los casetes que está en contacto con ella será la que a estos tiempos se vea saturada de la especie química, mientras que el resto de los casetes permanece libre de AGCL.

### 10.4.2 Transición

Conforme transcurre el tiempo, la concentración adimensional de AGCL aumenta, tanto en el tanque como en los casetes de ultrafiltración. Debido a que el gradiente de concentración es la

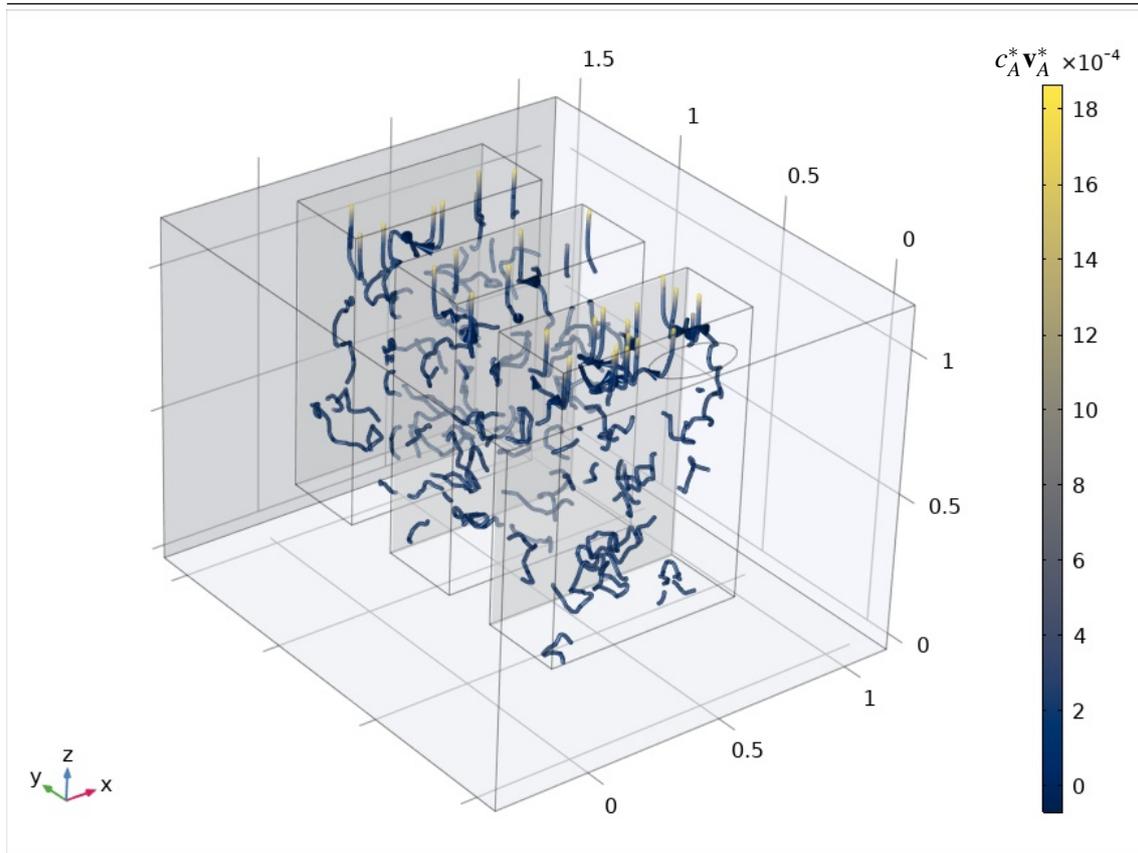


Figura 10.9. Líneas de corriente del flux total dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 0.001$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

fuerza impulsora para el transporte de masa, esto tiene impacto sobre los resultados mostrados en esta sección, los cuales corresponden al tiempo adimensional 1 de operación.

En primer lugar se muestra la Figura 10.12. Comparando la forma de las líneas de corriente de esta figura con aquellas observadas en la Figura 10.8. Aquí puede apreciarse ahora un patrón claramente definido para las líneas de corriente del flux total de masa. Una vez que se encuentra suficiente cantidad de AGCL en el tanque, la especie química se transporta por medio de mecanismos convectivos y difusivos en todo el sistema. Es posible notar que el patrón de flujo principal resulta envolvente alrededor de los casetes de ultrafiltración. Desde un punto de vista cuantitativo, vale la pena mencionar que gran parte del tanque presenta un flux total adimensional con magnitud de 0.02, mientras las zonas cercanas a la alimentación del tanque poseen flux totales mayores, siendo estos de hasta 0.17.

Al graficar el flux total de masa, es posible identificar qué mecanismo de transporte se lleva a cabo mayoritariamente en cada sección del tanque de membrana. Al compara las líneas de corriente

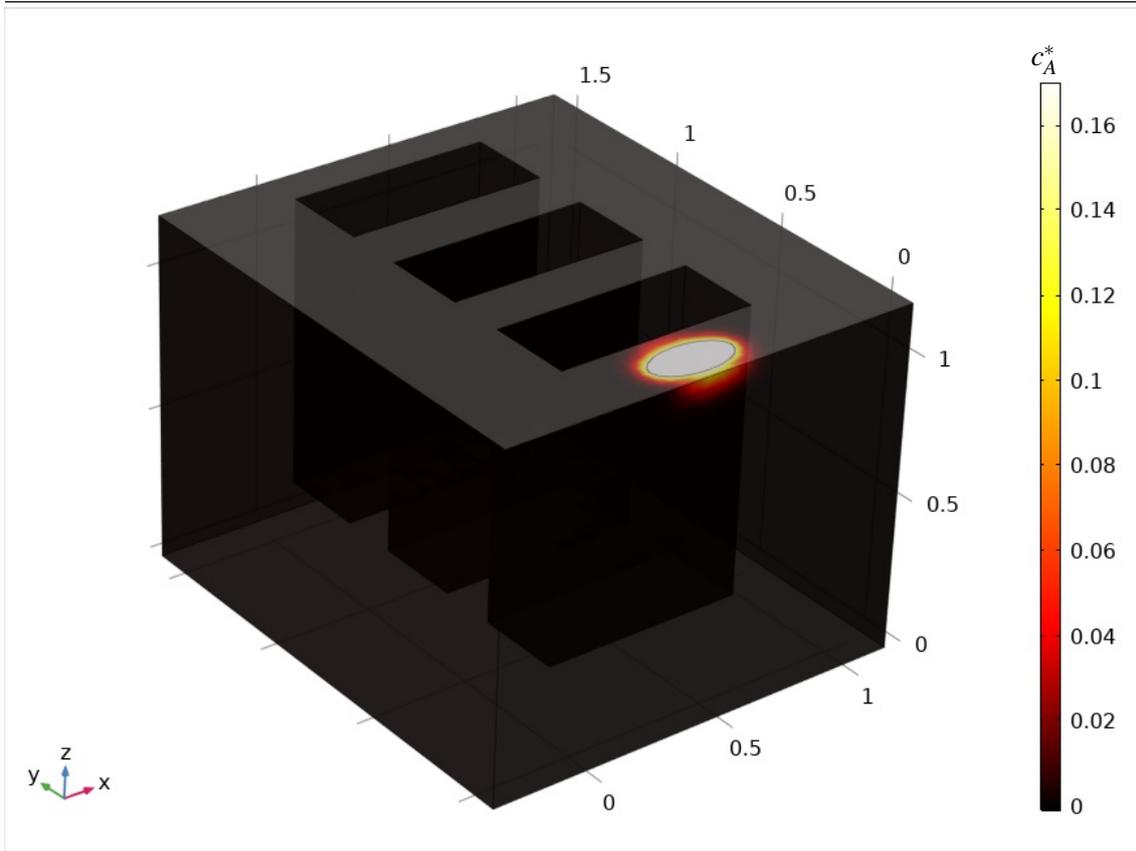


Figura 10.10. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie A dentro del tanque de membrana,  $t^* = 0.001$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

reportadas en las Figuras 10.12 y 10.6 se puede observar que las líneas de corriente en la parte inferior del tanque y en el perímetro del puerto de alimentación, son similares en ambas figuras. Esto sugiere un transporte de masa de AGCL mayoritariamente convectivo. Sin embargo, en la región superior del tanque las líneas son claramente diferentes en dirección y sentido, por lo que no es posible identificar el tipo de transporte mayoritario en estas zonas. Por un lado, la velocidad convectiva (del fluido) mantiene una dirección negativa sobre la componente  $z$  del flux y orientada hacia los casetes de ultrafiltración; por otro lado, el flux total muestra líneas horizontales que rodean a los casetes.

Al tiempo adimensional 1, las líneas de corriente del flux total de masa al interior de los casetes adquieren un patrón definido, el cual es diferente para cada casete. En el casete más cercano a la alimentación, el transporte de masa se da principalmente en dirección de las componentes  $y$  y  $z$ . Esto se atribuye a dos mecanismos principales. El primero es el gradiente de presión que ejerce la bomba que extrae el permeado. El segundo es por acción de la corriente de alimentación, ya que

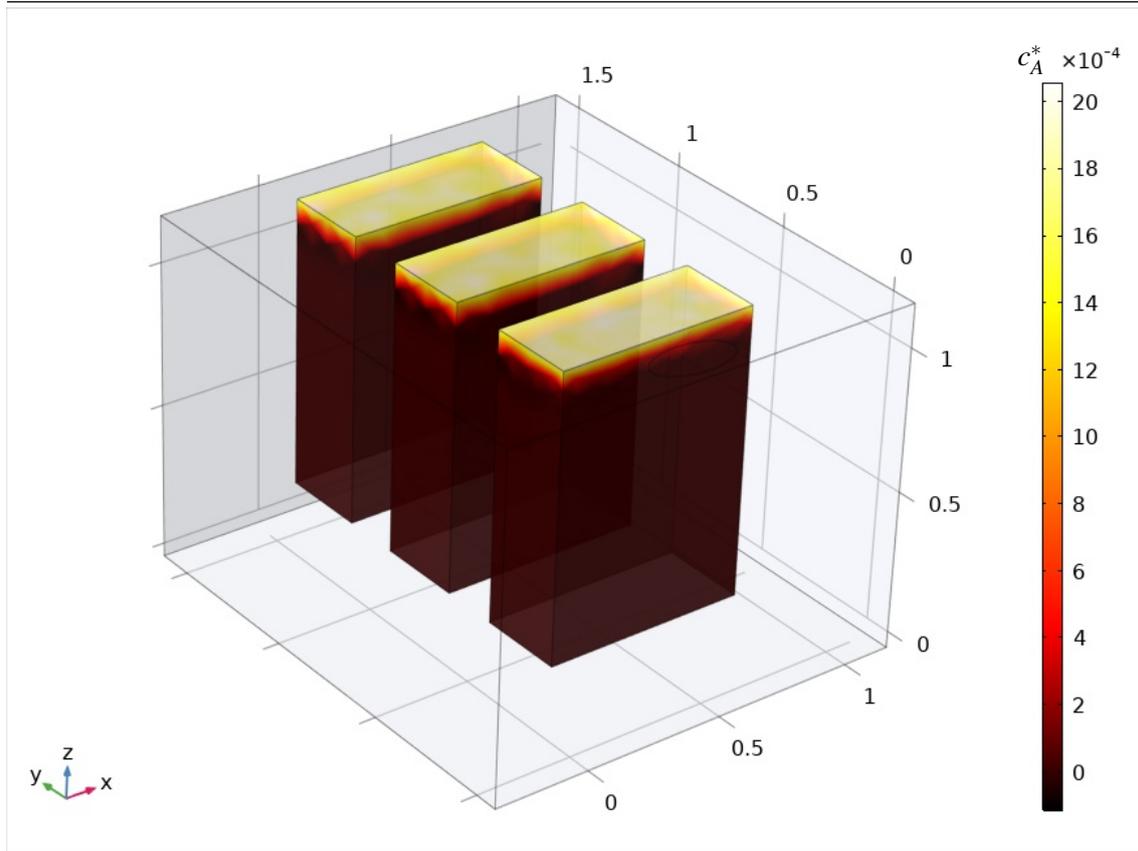


Figura 10.11. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie A dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 0.001$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

ésta moviliza al fluido dentro del tanque en la dirección  $y$ ; esto sucede por la localización del puerto de alimentación a uno de los extremos del tanque. Conforme más alejados se localizan los casetes del puerto de alimentación, menor será el efecto de este último mecanismo en el transporte de masa de AGCL. De esta forma, se hace notar que en el casete más lejano a la alimentación, las líneas de corriente del flux total son prácticamente verticales; mientras que en el casete localizado a mitad del tanque, todavía se aprecia la repercusión de la corriente de alimentación.

Dentro de los casetes de ultrafiltración, las líneas de corriente son diferentes en orientación, como se puede observar al comparar las Figuras 10.7 y 10.13. Debido a que esta comparación no permite identificar al tipo de transporte de masa mayoritario, se procede al análisis de las componentes del flux difusivo. En este tiempo que comprende a la transición entre el inicio de la alimentación y el estado estacionario, se observó lo siguiente: En las tres componentes, en la sección inferior de los casetes, el transporte difusivo es el mayoritario, representando entre el 80 y 100% del transporte total. Sin embargo, en la sección alta de los casetes cobra relevancia el

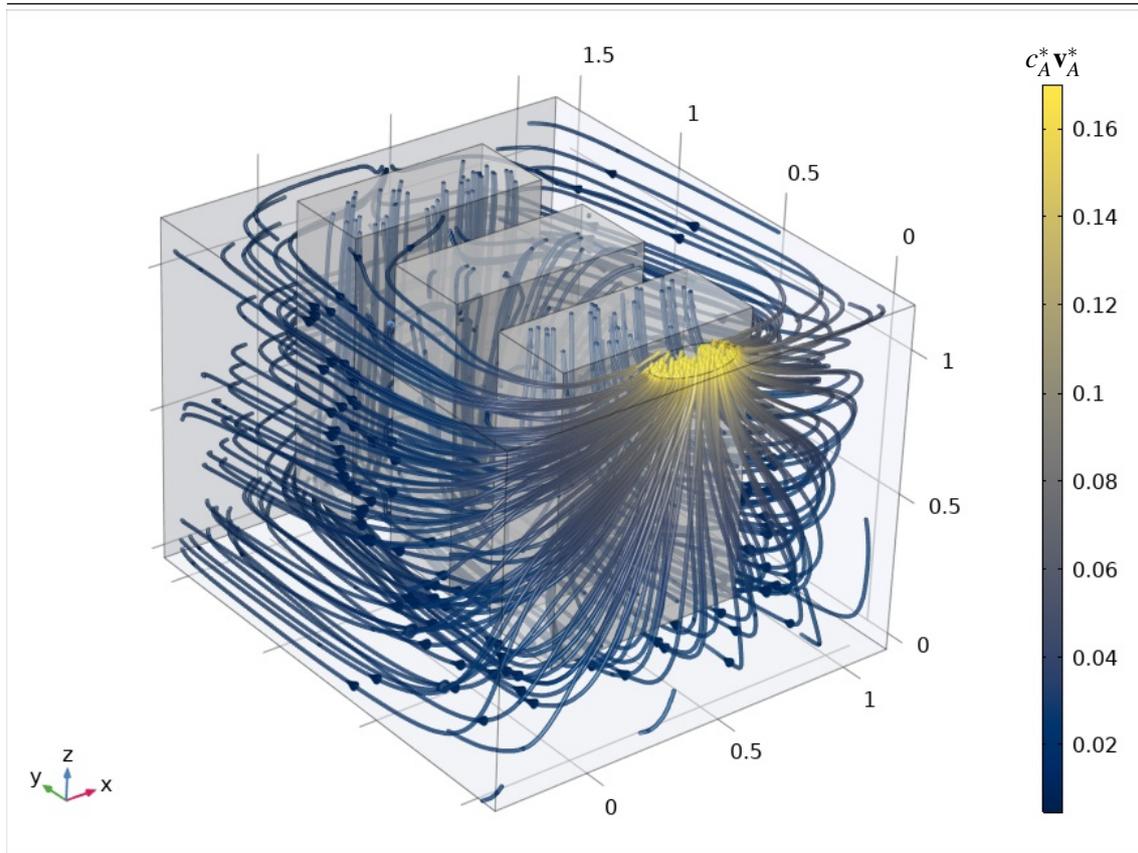


Figura 10.12. Líneas de corriente del flux total dentro del tanque de membrana,  $t^* = 1$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

transporte convectivo. En la componente  $z$  del flux, el transporte por convección puede representar hasta un 50% del transporte total; en las componentes  $x$  y  $y$  del flux, éste es mayor, y puede aportar entre un 75 y 80% del transporte total.

Para esta etapa de la operación, la distribución de la concentración de AGCL en el tanque presenta un gradiente, tal como se aprecia en la Figura 10.14. La concentración máxima es de 0.17 a la entrada del tanque, mientras que en la parte más lejana a la alimentación la concentración aún es cercana a cero. Se puede observar también que el casete 1 estará en contacto con concentraciones más elevadas de la especie química, por lo que esto repercute en la concentración máxima que pueda contabilizarse dentro de éste y con respecto a los otros dos casetes.

En la Figura 10.15 se puede notar cómo el gradiente de concentración al exterior de los casetes tiene un efecto sobre la concentración interna. El casete más próximo a la alimentación presenta mayor grado de saturación de AGCL, y conforme más alejados están los casetes del puerto de alimentación, se aprecia menos saturación. Además, se puede observar que la concentración

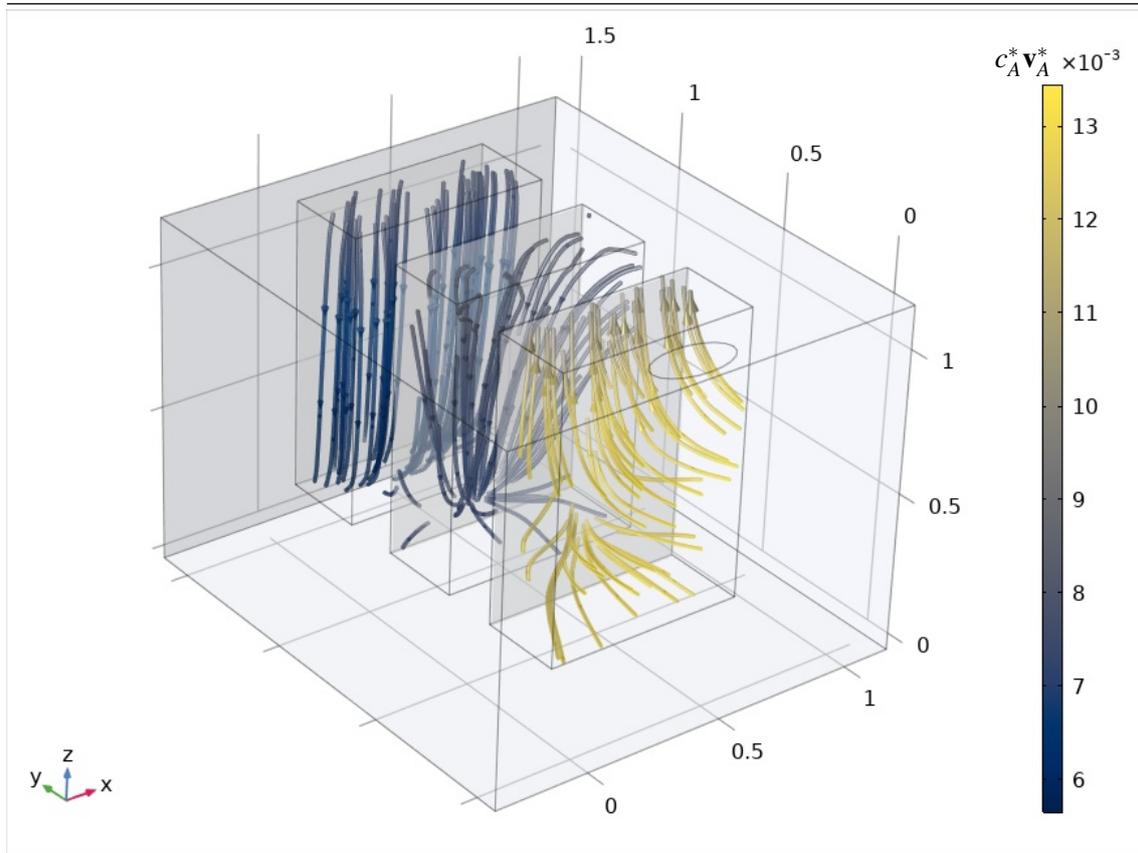


Figura 10.13. Líneas de corriente del flux total dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 1$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

de la especie química presenta un gradiente, donde los valores más elevados se localizan en la zona inferior de los casetes y la parte superior contiene, en promedio, menor cantidad de AGCL. Esto indica que la concentración del permeado a la salida de todos los casetes es menor que la concentración promedio en los mismos. Esto es un efecto deseable, y se da debido al efecto retentivo de las membranas de ultrafiltración, rechazando a la mayoría de los AGCL. Sólo una fracción de AGCL será capaz de atravesar la membrana, debido a que éstas no son infalibles.

### 10.4.3 Estado estacionario

Finalmente, se muestran los resultados obtenidos al tiempo adimensional 100, donde el tanque de membrana se encuentra en estado estacionario. Estos resultados se obtienen al suponer que no existen perturbaciones durante la operación del MBR que modifiquen las concentraciones de AGCL.

De la misma forma que para tiempos de transición, la identificación del mecanismo predomi-

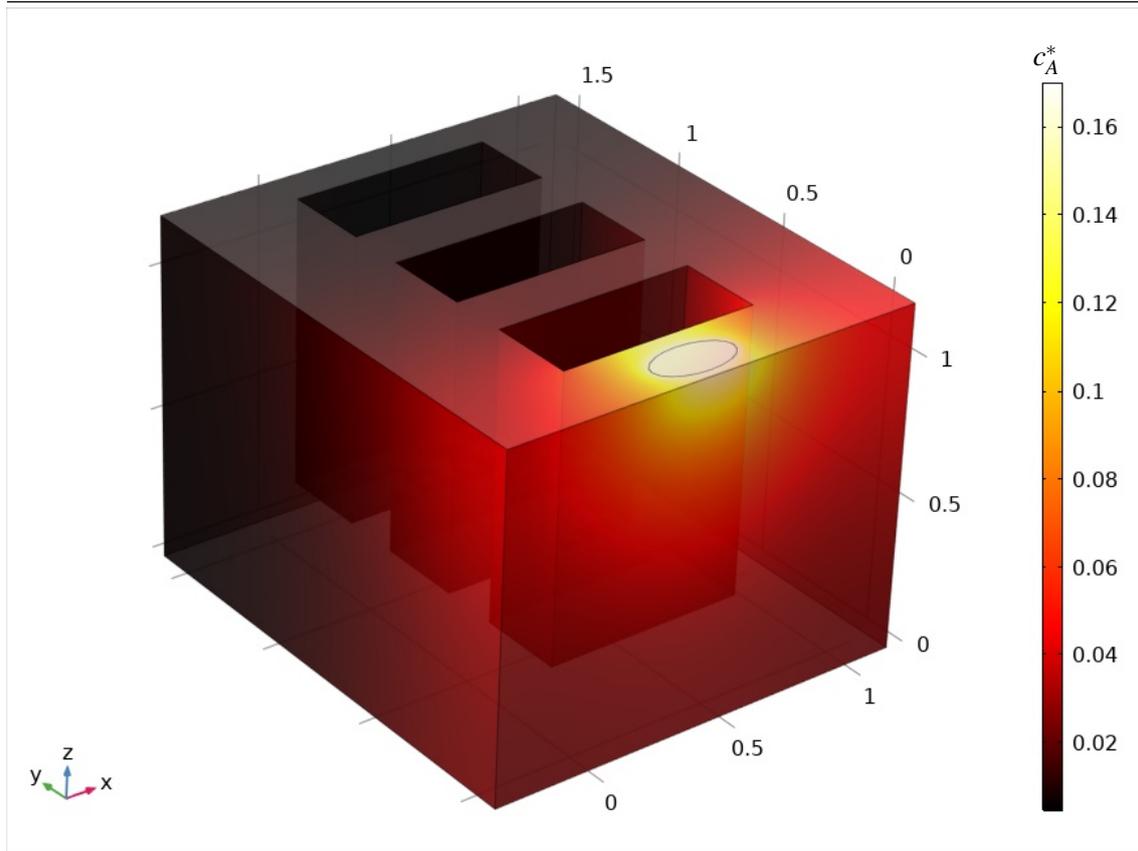


Figura 10.14. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie A dentro del tanque de membrana,  $t^* = 1$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

nante de transporte de masa en cada sección del tanque se puede llevar a cabo al comparar las líneas de corriente del flux total de masa con la velocidad del fluido. Las Figuras 10.6 y 10.16 permiten realizar este análisis para el fluido localizado en el tanque de membrana, de forma externa a los casetes. Así, es posible identificar que el transporte de masa es mayoritariamente convectivo cerca de la alimentación del tanque y en todo el fondo del mismo. En la superficie, a diferencia, las líneas de corriente del flux total no coinciden con la dirección que dictan las del fluido.

De la misma manera que para el líquido fuera de los casetes, se comparan ahora las Figuras 10.7 y 10.17. No se encuentra similitud clara entre las líneas de corriente del flux total y de la velocidad convectiva (del fluido), por lo que no es posible determinar si el transporte se lleva a cabo mayoritariamente por difusión o convección. Esto guarda sentido debido a la menor velocidad que tiene el fluido dentro del casete con respecto en la parte externa de estos.

Mediante el análisis de las componentes del flux difusivo se observó que en la mayor parte de los casetes, el transporte mayoritario en las tres componentes ( $x$ ,  $y$  y  $z$ ) es el difusivo. La única

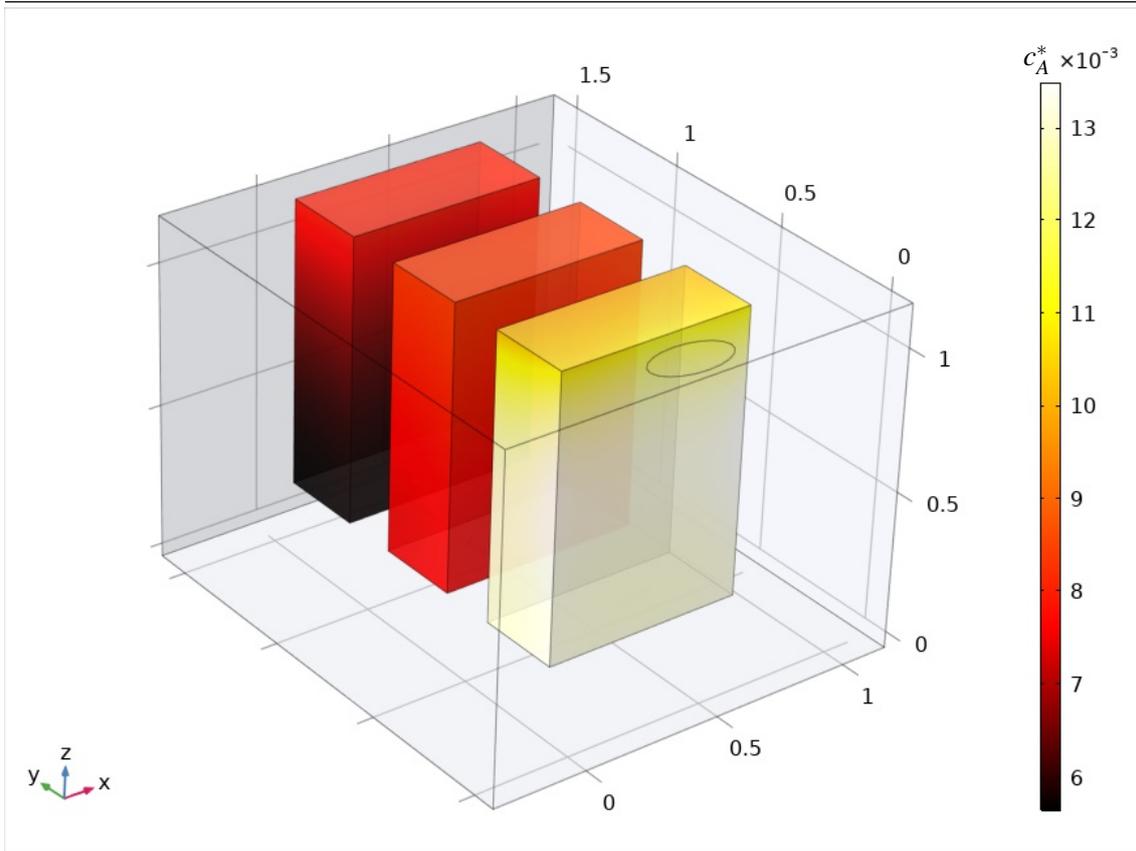


Figura 10.15. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie  $A$  dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 1$ ,  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

excepción es la parte superior de los mismos, donde la velocidad del fluido es mayor y donde el transporte de masa por convección cobra más importancia, representando el flux convectivo hasta el 7% del flux total. El transporte por difusión se vuelve dominante en la componente  $z$  del flux del casete de ultrafiltración, en menor medida en las direcciones  $x$  y  $y$  del flux. Esto corresponde con la orientación y sentido del fluido y del flux total, ya que estos están siendo afectados principalmente por la presión de vacío a la salida de los casetes (en dirección vertical). Pero también existe cierto efecto de la localización del punto de alimentación, ya que promueve, en menor proporción, el transporte de masa sobre la componente  $y$  del flux. Para la componente  $z$  del flux de los casetes, el transporte por difusión representa más del 93% en todo el dominio. En la sección media y baja este porcentaje asciende a valores entre 98 y 99%, mientras que en la zona superior puede localizarse entre el 93 y 98%. En la componente  $x$  del flux, la difusión en la sección media y baja de todos los casetes representa entre el 90% y 100% del flux total, mientras que en la región más próxima a la superficie del tanque este porcentaje disminuye en algunas zonas, resultando en valores por arriba

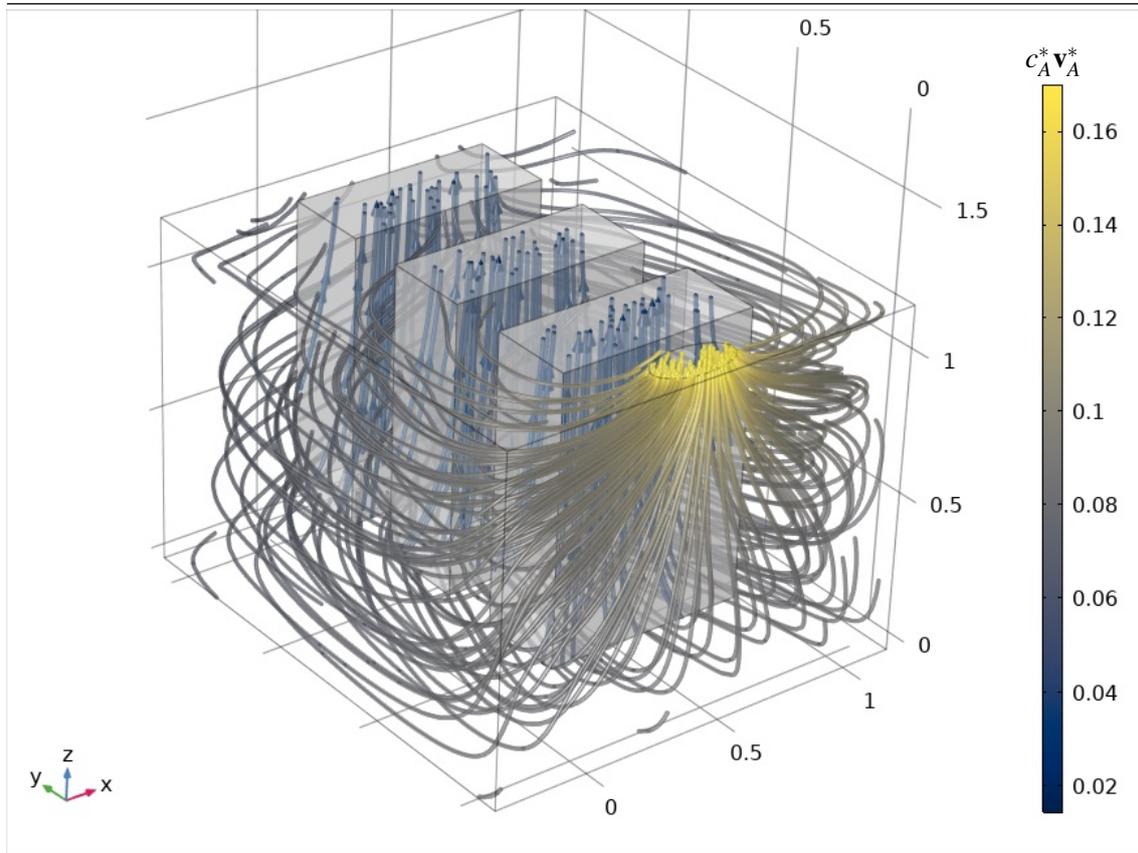


Figura 10.16. Líneas de corriente del flux total dentro del tanque de membrana,  $t^* = 100$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

del 50%. Sólo en la componente  $x$  del flux y en la región del casete más próxima a la alimentación del tanque es que la proporción de transporte difusivo con respecto al flux total cae hasta alrededor del 40%. Por su parte, en la componente  $y$  del flux, las secciones baja y media de los casetes conservan las mismas proporciones que en la componente  $x$  del flux; sin embargo, la parte superior de los casetes presenta menor contribución por parte de la difusión en el transporte de masa, con respecto a la componente anteriormente descrita. En esta zona se observó menor proporción de transporte difusivo, representando en la mayoría de la zona, entre el 40 y el 80% del flux total.

En la Figura 10.18 se observa la concentración a cada punto del tanque, una vez que se alcanza el estado estacionario. A diferencia de en tiempos más tempranos, la concentración de AGCL no es cero en ninguna parte del tanque. Sin embargo, es posible notar que aún existe un marcado gradiente de concentración de la especie química. Este gradiente se forma probablemente debido a la captación generada por un gradiente de presión en el primer casete. Los AGCL se quedan mayoritariamente retenidos en este casete, por lo que la concentración de AGCL en la región

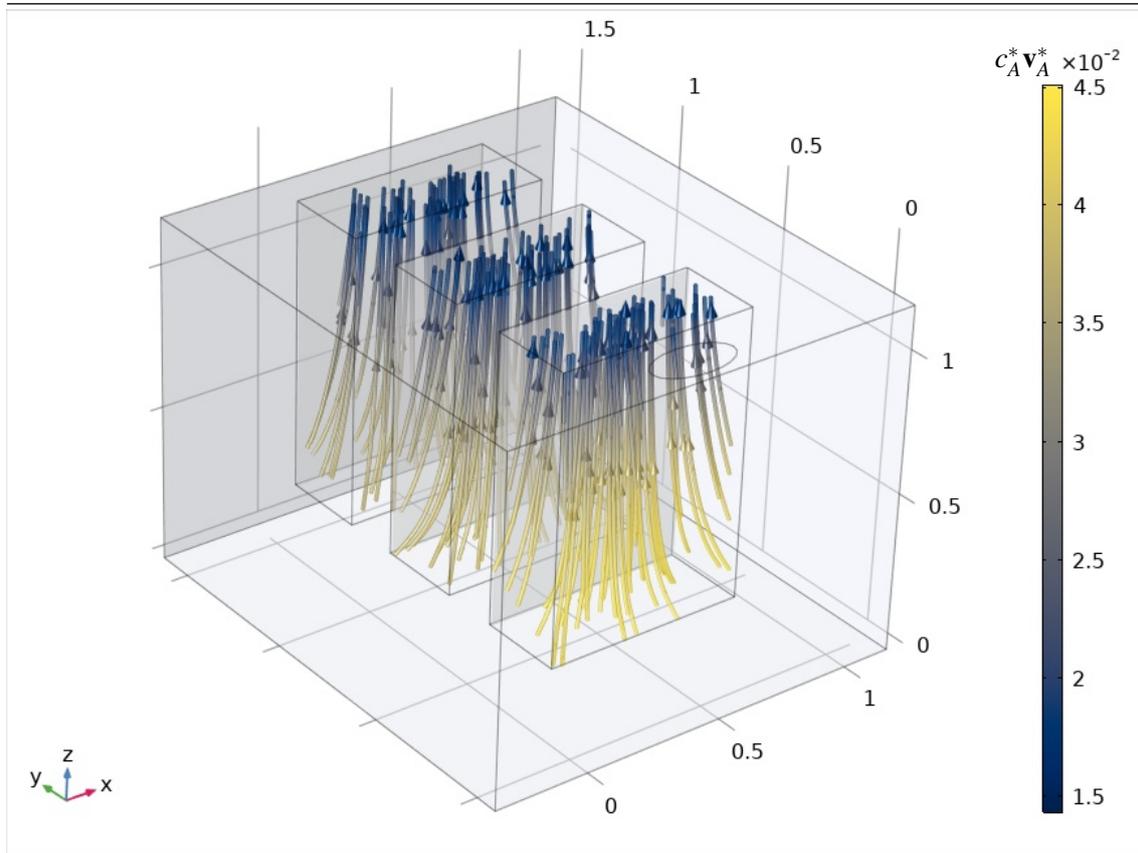


Figura 10.17. Líneas de corriente del flujo total dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 100$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{Ane}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

posterior del tanque es menor a la de la entrada. Además, debido a que el segundo casete realiza una acción similar, al fondo del tanque la concentración adimensional de la especie química ya es un orden de magnitud menor a la de la entrada.

El gradiente de concentración adimensional antes mencionado genera que el casete próximo a la alimentación esté más saturado de AGCL (Figura 10.19). Esto no se aprecia de forma importante entre el segundo y el tercer casete de ultrafiltración. Una característica observada a través del tiempo es la mayor saturación con AGCL en la sección superior de todos los casetes con respecto al resto de cada casete; esto, como se comentó, es atribuido a la localización del puerto de alimentación. Algo que debe hacerse notar es que la concentración adimensional promedio a la salida de los casetes representa entre el 1.5 y 2% de la concentración inicial de AGCL en el tanque aerobio. Lo anterior corresponde con las eficiencias de remoción de G&A reportadas experimentalmente en la literatura para este tipo de reactores (Liu y col., 2003; Kurian y col., 2005; Nakhla y col., 2006; Acharya y col., 2006a,b). La capacidad de reducción de la concentración de grasas del MBR de hasta un

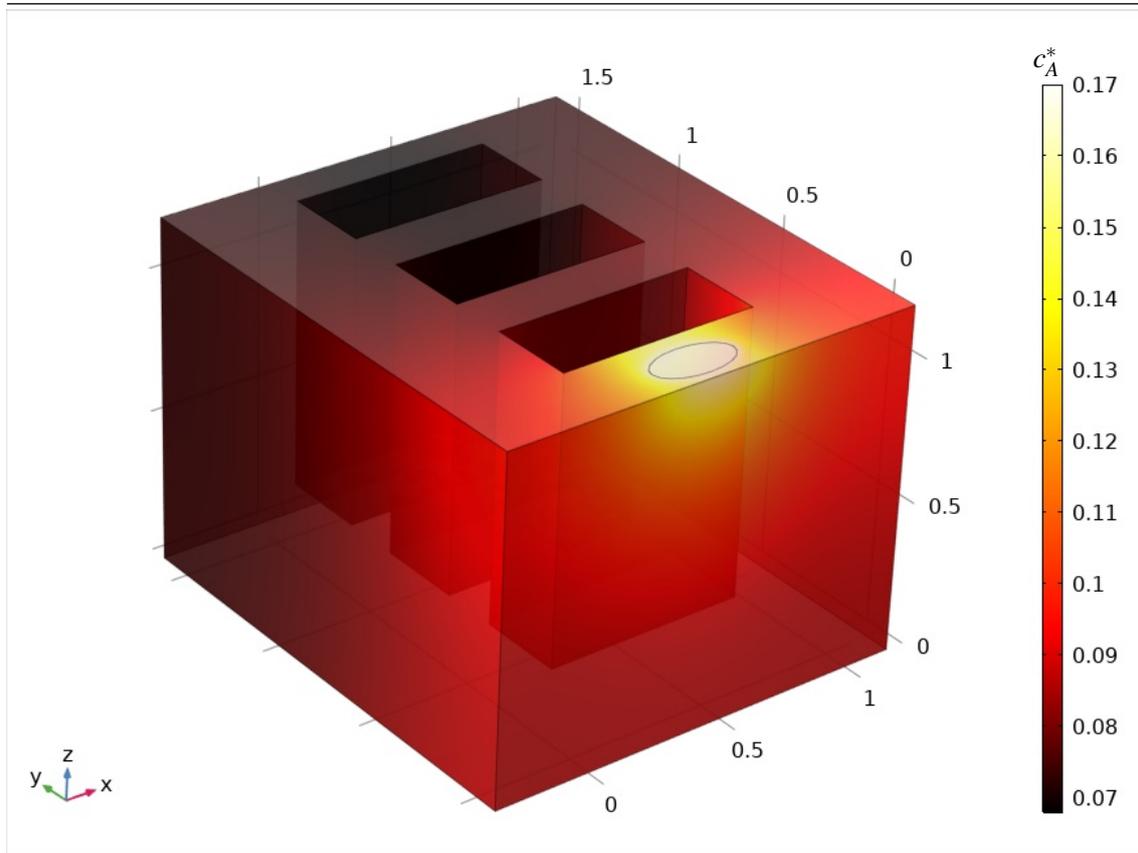


Figura 10.18. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie A dentro del tanque de membrana,  $t^* = 100$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

98-98.5% resulta en concentraciones aproximadas de AGCL a la salida del permeado de menos de  $0.1 \text{ mol/m}^3$  (entre 21.9 y  $29.2 \text{ mg L}^{-1}$ ), lo cual posiciona a la concentración en el permeado muy cercana al límite máximo establecido por el PROY- NOM-001-SEMARNAT-2017, la cual establece  $21 \text{ mg L}^{-1}$  como límite superior. Debe recordarse que el MBR no es la última operación unitaria dentro del tren de tratamiento de aguas residuales, por lo que no resulta improbable alcanzar concentraciones por debajo del valor establecido en la norma al final de las operaciones restantes del tratamiento.

Las condiciones aquí presentadas son aquellas que permanecerán en el sistema si no se producen perturbaciones en el mismo. Modificaciones en el tanque aerobio, tales como fluctuaciones en la concentración de alimentación, modificación en las condiciones de los flóculos o en su cantidad, o un aumento o decremento en la proporción de microorganismos degradadores dentro de éstos, pueden tener efectos positivos o negativos en los resultados del tanque de membrana. Además, un cambio en la permeabilidad de las membranas de este segundo tanque también puede modificar las

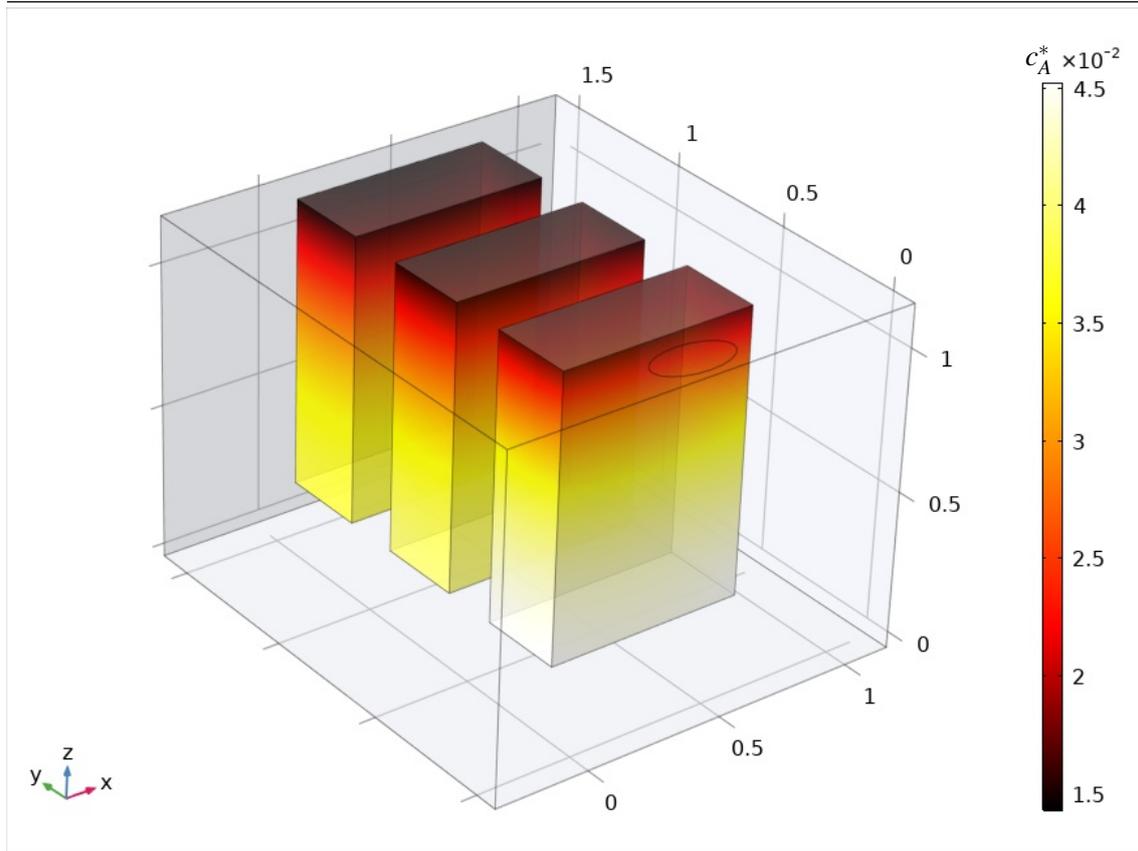


Figura 10.19. Gráfica de superficie de la concentración adimensional de la especie A dentro de los casetes de ultrafiltración,  $t^* = 100$ .  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ,  $Bi_{\zeta o} = 7$ ,  $Pe = 1$ ,  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$ ,  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta}) = 0.3$ ,  $(\varepsilon_{\eta} + \varepsilon_{\beta} + \varepsilon_{\gamma}) = 0.4$ ,  $c_{Ae}^{\eta*} = 0.17$ ,  $c_{A\eta e}^* = 0.17$ . Condiciones iniciales:  $c_{A\eta 0}^* = 0$ ,  $c_{A\zeta 0}^* = 0$ .

condiciones finales en estado estacionario.

## 10.5 Resumen del capítulo

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones numéricas que permiten el análisis paramétrico del modelo matemático del tanque de membrana. Los parámetros más importantes identificados son los números de Biot (que definen la permeabilidad de la membrana), y el número de Péclet (del cual depende la velocidad del fluido responsable del transporte de masa de la especie por convección).

Las mejores condiciones de diseño adimensionales para este tanque son: Es deseable que la porosidad del medio que compone a las fibras huecas sea elevada (se recomienda que sea de 0.75), mientras que la fracción volumétrica del medio filtrante en el dominio del casete tome valores de 0.6. Los valores adimensionales exactos son:  $\varepsilon_{\beta\kappa} = 0.7$  y  $\varepsilon_{\sigma} = 0.6$ . Finalmente, debido a que la

fracción de medio filtrante en el casete de ultrafiltración debe ser elevada, esto limita a la fracción líquida a menos de 0.5, utilizándose en este trabajo  $\varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta = 0.3$ . Al incluir a la fase gas, la fracción de fluido no debe sobrepasar tampoco a 0.5, por lo que se estableció en este estudio a  $\varepsilon_\eta + \varepsilon_\beta + \varepsilon_\gamma = 0.4$ .

Las mejores condiciones de operación adimensionales para el tanque de membrana son: Grandes resistencias a la transferencia de masa entre el líquido y la membrana, lo cual corresponde a valores del número de Biot menores a uno y preferentemente cercanos a cero (*i.e.*,  $Bi_{\eta\zeta} = 0.1$ ). Además, se requieren bajas resistencias a la transferencia de masa entre las fibras huecas y el permeado, dadas por valores para el número de Biot mayores a uno y menores a siete. En el presente análisis se utilizó  $Bi_{\zeta o} = 7$ . Esto está relacionado con la velocidad que adquiere el fluido circundante a los casetes, pues entre menor sea el grado de agitación, mayores serán las resistencias a la transferencia de masa. La velocidad se controla indirectamente a través del número de Péclet. Son preferibles magnitudes pequeñas para éste, menores o iguales a 3 (en este análisis  $Pe = 1$ ). Mediante el número de Schmidt, los valores de  $Pe$  limitan la magnitud del número de Reynolds a valores por debajo de  $10^{-2}$  fuera de los casetes de ultrafiltración y por debajo de  $10^{-1}$  al interior de los mismos. Esto corresponde a flujos lentos, entre reptantes y laminares.

De la misma forma que para el tanque aerobio, el valor específico dimensional para cada parámetro puede obtenerse al utilizar las definiciones dadas en la sección 8.3. La validación del modelo para este tanque puede llevarse a cabo mediante la comparación con datos experimentales medibles de un sistema que cumpla con las suposiciones indicadas para este trabajo. Lo anterior puede llevarse a cabo mediante mediciones de la concentración de AGCL tanto en la región líquida como en el permeado de cada uno de los casetes de ultrafiltración. Además, dado que el modelo matemático de flujo en las membranas es de tipo Darcy, la permeabilidad de los casetes puede determinarse a partir del conocimiento de la velocidad promedio de los fluidos que pasan a través de ella y del gradiente de presión aplicado. Así también, puede determinarse la velocidad del fluido exterior a ésta. Al igual que el modelo del tanque aerobio, éste también proporciona más información de la que experimentalmente podría medirse, lo que representa una ventaja con respecto a modelos empíricos.

El desarrollo de modelos 3D del tanque de membrana permitió evaluar la dinámica de la concentración adimensional en cada punto del tanque y de los casetes, así como describir los fenómenos que tienen lugar en estos dominios y que ayudan a explicar los resultados obtenidos. Fue

posible visualizar la formación de los patrones de flujo en las líneas de corriente del flux total de masa, y explicar, hasta cierto punto, cómo se relacionan con la geometría del sistema. A lo largo del tiempo se observa cómo, a través de mecanismos de transporte de masa difusivos y convectivos, se distribuye la especie química a través del tanque, y cómo esto genera la formación de un gradiente de concentración que se mantiene inclusive a tiempos largos de operación. La concentración de AGCL presente en el fluido externo a los casetes influye en la saturación de éstos últimos, y a su vez, en la concentración del permeado. Se observó que el mecanismo de transporte de masa mayoritario dentro de los casetes es el difusivo, debido principalmente a la menor velocidad del fluido en estas regiones. Cabe mencionar que las simulaciones numéricas llevadas a cabo en este capítulo, en donde no se usa un enfoque de medio efectivo para modelar a los casetes de ultrafiltración, son computacionalmente menos demandantes que las correspondientes a la CFD. De esta forma, puede concluirse que el tipo de modelado desarrollado en este trabajo es más versátil que las simulaciones de tipo CFD, manteniendo la información esencial de los diversos niveles de escala de este sistema multifásico.

A pesar de las simplificaciones llevadas a cabo, las condiciones de operación utilizadas permitieron modelar un sistema en el cual los AGCL son retenidos en el tanque, mientras que el permeado contiene bajas concentraciones de esta especie química. La concentración obtenida para el permeado a través de las simulaciones numéricas es del 1.5-2% de la concentración inicial alimentada al tanque aerobio, y corresponde con lo reportado experimentalmente en la literatura.

# Conclusiones, prospectivas y anexos

<b>11</b>	<b>Conclusiones</b> .....	<b>184</b>
<b>12</b>	<b>Prospectivas</b> .....	<b>188</b>
<b>13</b>	<b>Nomenclatura</b> .....	<b>190</b>
	<b>Bibliografía</b> .....	<b>194</b>
<b>A</b>	<b>Simulación del tanque aerobio - especie</b> <i>A</i> .....	<b>209</b>
<b>B</b>	<b>Simulación del tanque aerobio - especie</b> <i>B</i> .....	<b>213</b>
<b>C</b>	<b>Simulación del tanque de membrana</b>	<b>217</b>

## 11. Conclusiones

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático para describir el transporte de masa y reacción dentro de biorreactores de membrana. El modelo tiene como característica el filtrado de la información desde la escala microscópica y hasta el nivel de reactor. Aunque al término de cada capítulo de este documento se detallan los resultados parciales correspondientes, es pertinente presentar en este apartado las conclusiones generales del trabajo para cada tanque del biorreactor de membrana.

### **Tanque aerobio**

El uso de un proceso de escalamiento permitió desarrollar un modelo matemático al nivel del tanque a partir de las ecuaciones de transporte a escala microscópica. El modelo matemático desarrollado consiste en dos ecuaciones para el transporte y reacción de los AGCL, y en tres ecuaciones para el oxígeno; además de dos ecuaciones de continuidad promediadas en todo el tanque. Dado que la región en donde ocurren los cambios más importantes de los AGCL y el oxígeno son los flocos, se conserva la información de los cambios espacio-temporales de las especies en las ecuaciones macroscópicas correspondientes. Mientras que en las otras fases y regiones el modelo solo contempla los cambios temporales de las variables dependientes.

Los parámetros determinantes para promover el transporte y degradación de los AGCL son: el área interfacial por unidad de volumen de los flóculos presentes en el sistema, la proporción del volumen del flóculo que representa la matriz extracelular y la fracción volumétrica de las células que son capaces de oxidar AGCL con respecto a las que no. Los factores que mayor efecto tienen sobre el transporte y consumo de oxígeno son el flujo volumétrico de aire y la tasa máxima de consumo de este sustrato. No se encontró limitación de oxígeno bajo las condiciones que favorecen la degradación de AGCL.

Entre las condiciones adimensionales de diseño más importantes, se hacen notar: Áreas por unidad de volumen entre el líquido y el flóculo, entre el líquido y la fase oleosa y entre el líquido y las burbujas de aire con valores cercanos, pero por debajo, de uno. Tasas hidrolíticas, determinadas por el módulo de Thiele, por debajo de uno. Velocidad específica de consumo de AGCL cercana a 10 con una constante de saturación  $\leq 10^{-3}$ . Fracciones volumétricas para la matriz extracelular por debajo de 0.7 y fracciones volumétricas para las células que consumen AGCL lo más elevadas posible. Para el oxígeno, no se consideran limitaciones para la degradación de AGCL mientras la velocidad específica de consumo de este sustrato y la constante de saturación se encuentren en o por debajo de  $10^{-2}$ .

Entre las condiciones de operación adimensionales más favorables que se encontraron, destacan las siguientes: Flujos volumétricos de alimentación para el reactor del orden de  $10^{-5}$  y flujos volumétricos de aire del orden de  $10^{-2}$ . Bajas resistencias a la transferencia de masa entre la región líquida y los flóculos, tanto para los AGCL como para el oxígeno, así como entre las burbujas y la región líquida (para el oxígeno), lo cual se traduce en valores, para los números de Biot correspondientes, mayores a uno.

### **Tanque de membrana**

El modelo matemático deducido está compuesto por ecuaciones de medio efectivo que describen el transporte de masa y cantidad de movimiento en los casetes de ultrafiltración. A partir del proceso de escalamiento, se concluye que el modelo macroscópico para el transporte de masa de los AGCL, bajo la suposición de equilibrio local másico, es del tipo convección-dispersión. Mientras que, para el transporte de cantidad de movimiento, el modelo macroscópico es de tipo ley de Darcy. Estas ecuaciones ya no distinguen entre cada componente del dominio y presentan la ventaja de incorporar coeficientes predecibles a partir de la solución de los problemas de cerradura asociados.

A partir de las soluciones numéricas del modelo se concluye que los factores con mayor

repercusión sobre la concentración de AGCL en el permeado son: la capacidad retentiva de la membrana de ultrafiltración y la velocidad del fluido contenido en el tanque. A su vez, la capacidad retentiva de la membrana está determinada por dos factores: las resistencias a la transferencia de masa entre el líquido y el casete, y las resistencias a la transferencia de masa entre las fibras huecas y el permeado. En la mayor parte del fluido externo a los casetes, el transporte de masa está regido principalmente por la convección, mientras que en los casetes de ultrafiltración el transporte es predominantemente difusivo.

Las mejores condiciones de diseño adimensionales para el tanque de membrana son: Porosidad del medio que compone a las fibras huecas de 0.75, mientras que la fracción volumétrica del medio filtrante en el dominio del casete tome valores de 0.6. Fracción líquida de menos de 0.5 y fracción de fluido que no sobrepase 0.5. Mientras que las mejores condiciones de operación para este tanque son: Considerables resistencias a la transferencia de masa entre el líquido y la membrana, lo cual corresponde a valores del número de Biot menores a uno y preferentemente cercanos a cero. Mínimas resistencias a la transferencia de masa entre las fibras huecas y el permeado, dadas por valores para el número de Biot mayores a uno y menores a siete. Magnitudes para el número de Péclet menores o iguales a 3. Magnitud del número de Reynolds a valores por debajo de  $10^{-2}$  fuera de los casetes de ultrafiltración y por debajo de  $10^{-1}$  al interior de los mismos.

Bajo las condiciones operativas estudiadas, la concentración en el permeado se redujo hasta un 1.5-2% con respecto a la concentración de alimentación del tanque aerobio. Esto corresponde con las eficiencias reportadas para los MBR y permite obtener un efluente con características cercanas a las requeridas por normas mexicanas para descarga en aguas nacionales.

Con base en lo anterior, se puede concluir que se encontraron condiciones de diseño y operación favorables para el transporte de masa de ácidos grasos de cadena larga y de oxígeno en un biorreactor de membrana. Esto se logró a través del desarrollo, solución y análisis de modelos matemáticos de medio efectivo. Los resultados presentados en este trabajo son de utilidad para trabajos experimentales futuros, tanto para el diseño como para la mejora de biorreactores de membrana ya existentes.

El alcance de este trabajo se limita a las mejores condiciones de operación a través de parámetros y números adimensionales. Es posible obtener valores dimensionales que satisfagan a lo encontrado en este análisis paramétrico al utilizarse las definiciones dadas en las secciones 7.6 y 8.3 para el tanque aerobio y de membrana, respectivamente. De esta forma estos parámetros y números

adimensionales pueden ser utilizados para cualquier tipo de tanque aerobio que cumpla con las suposiciones del modelo detalladas en capítulos anteriores.

## 12. Prospectivas

Se plantean los siguientes puntos a fin de mejorar y dar continuidad al trabajo desarrollado en la presente tesis:

1. Validar el modelo con datos experimentales y situaciones donde se cumplan las suposiciones planteadas, a fin de evaluar los alcances del modelo de equilibrio.
2. Obtener la solución de los problemas de cerradura del tanque de membrana, para predecir los coeficientes de medio efectivo para la geometría específica del sistema.
3. Plantear y resolver los problemas de cerradura bajo un esquema de no equilibrio.
4. Evaluar la incorporación del fenómeno de ensuciamiento de la membrana mediante acumulación superficial en el desarrollo del modelo de medio efectivo para los casetes de ultrafiltración.
5. Evaluar casos en los que no se cumpla la suposición de mezcla perfecta en el tanque aerobio, a través de modelos mixtos para la dependencia espacial.
6. Evaluar el uso de modelos diferentes al de Beavers-Joseph para el transporte en la frontera del medio poroso de la membrana con la región líquida que la rodea.
7. Analizar el uso modelos alternativos a Darcy-Brinkman para la simulación del transporte de cantidad de movimiento en el tanque de membrana.
8. Evaluar el efecto que tiene el considerar distribuciones de tamaños de burbuja en el transporte

de oxígeno en el tanque aerobio.

9. Incorporar la inhibición por sustrato y por producto a las ecuaciones que describen el transporte y consumo de AGCL.
10. Utilizar factores de forma que permitan compensar la geometría esférica supuesta para los flóculos.

Estos y otros puntos de mejora se estudiarán en trabajos futuros.

## 13. Nomenclatura

$a_{\sigma i}$	Área interfacial por unidad de volumen de la frontera entre la región- $\sigma$ y la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \eta$ ), $m^{-1}$
$A_{\gamma\eta}$	Área superficial entre la fase- $\gamma$ y la región- $\eta$ , $m^2$
$A_{\eta\lambda}$	Área superficial entre la región- $\eta$ y la fase- $\lambda$ , $m^2$
$A_{\eta\omega_j}$	Área superficial entre la región- $\eta$ y el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ , $m^2$
$\mathcal{A}_i$	Superficie del dominio de promediado de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \sigma$ )
$\mathcal{A}_{ij}$	Superficie entre la fase (o región)- $i$ y la fase (o región)- $j$ ( $i, j = \gamma, \eta, \kappa, \beta, \sigma, i \neq j$ )
$\mathcal{A}_{\gamma d}$	Superficie entre la fase- $\gamma$ y el difusor del tanque aerobio
$\mathcal{A}_{\gamma sup}$	Superficie de salida de la fase- $\gamma$ del tanque aerobio
$\mathcal{A}_{\eta e}$	Superficie de entrada del tanque aerobio
$\mathcal{A}_{\eta s}$	Superficie de salida del tanque aerobio
$\mathbf{b}_i$	Variable de cerradura que mapea $\mathbf{l} \cdot \nabla \langle c_A \rangle$ sobre $\tilde{c}_{Ai}$ ( $i = \beta, \eta, \sigma$ ), $m$
$Bi_{ij}$	Número de Biot para la especie $i$ ( $i = A, B$ ) entre la región- $\eta$ y la región- $\omega$ en su $j$ -ésimo tamaño
$Bi_{\gamma\eta}$	Número de Biot para la especie $B$ entre la fase- $\gamma$ y la región- $\eta$
$Bi_{\eta\zeta}$	Número de Biot para la especie $A$ entre la región- $\eta$ y la región- $\zeta$

$Bi_{\zeta o}$	Número de Biot para la especie $A$ entre la región- $\zeta$ y el permeado
$c_{Ai}$	Concentración promedio intrínseca de la especie $A$ en la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \sigma, \zeta$ ), mol/m <sup>3</sup>
$c_{A\eta e}$	Concentración molar de la especie $A$ en la región- $\eta$ a la entrada del tanque aerobio, mol/m <sup>3</sup>
$c_{B\gamma}$	Concentración molar de la especie $B$ en la fase- $\gamma$ , mol/m <sup>3</sup>
$c_{B\gamma d}$	Concentración molar de la especie $B$ en la fase- $\gamma$ en la superficie con el difusor, mol/m <sup>3</sup>
$c_{i\eta}$	Concentración molar de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en la región- $\eta$ , mol/m <sup>3</sup>
$c_{i\omega j}$	Concentración molar de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en el $j$ -ésimo tamaño de flóculo de la región- $\omega$ , mol/m <sup>3</sup>
$c_{\lambda}$	Concentración molar de la especie $A$ en la fase- $\lambda$ , mol/m <sup>3</sup>
$c_A^{\eta}$	Promedio intrínseco de la concentración de la especie $A$ en la región- $\eta$ , mol/m <sup>3</sup>
$c_B^i$	Promedio intrínseco de la concentración de la especie $B$ en la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta$ ), mol/m <sup>3</sup>
$\langle c \rangle$	Concentración local promedio, mol/m <sup>3</sup>
$\langle c_{Ai} \rangle^i$	Concentración promedio intrínseca de la especie $A$ en la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \eta, \sigma$ ), mol/m <sup>3</sup>
$\tilde{c}_{Ai}$	Desviaciones espaciales de la concentración de la especie $A$ en la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \eta, \sigma$ ), mol/m <sup>3</sup>
$\mathbf{d}_{ij}$	Variable de cerradura que mapea a $\frac{1}{\mu_j} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_j \rangle^j$ sobre $\widetilde{\mathcal{P}}_i$ ( $i, j = \beta, \gamma, \eta, \sigma$ )
$D_{ij}$	Coefficiente de difusividad efectiva de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) asociado al modelo de equilibrio en el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ , m <sup>2</sup> /s
$D_i^*$	Relación entre el coeficiente de difusividad efectiva y el coeficiente de difusividad molecular de la especie $i$ ( $i = A, B$ )
$\mathbf{D}_{ef}$	Tensor de dispersión efectiva de la especie $A$ en el casete de ultrafiltración, m <sup>2</sup> /s
$\mathbf{D}_{ij}$	Variable de cerradura que mapea a $\frac{1}{\mu_j} \cdot \nabla \langle \mathcal{P}_j \rangle^j$ sobre $\mathbf{v}_i$ ( $i, j = \beta, \gamma, \eta, \sigma$ )
$\mathbf{D}^*$	Tensor de dispersión total para la especie $A$ en la región- $\sigma$ , m <sup>2</sup> /s
$\mathcal{D}_{Ai}$	Coefficiente de difusividad molecular para la especie $A$ en la región- $i$ ( $i = \eta, \sigma$ ), m <sup>2</sup> /s
$\mathcal{D}_{i\beta}$	Coefficiente de difusividad molecular para la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en la fase- $\beta$ , m <sup>2</sup> /s

$\mathbf{H}_{ij}$	Tensor de permeabilidad relativa de la fase (o región)- $i$ en la fase (o región)- $j$ ( $i, j = \beta, \gamma, \eta, \sigma$ ), $\text{m}^2$
$\mathbf{H}_\sigma$	Tensor de permeabilidad aparente de la fase- $\beta$ en la región- $\sigma$ , $\text{m}^2$
$\mathbf{I}$	Tensor identidad
$k^\beta$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa entre la región- $\sigma$ y la fase- $\beta$ , $\text{m/s}$
$k^{\gamma\eta}$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa entre la fase- $\gamma$ y la región- $\eta$ , $\text{m/s}$
$k_{\lambda\eta}$	Constante de reacción en la frontera entre la región- $\eta$ y la gota de tamaño $i$ de la fase- $\lambda$ , $\text{m/s}$
$k_{ij}^{\eta\omega}$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) para la frontera entre la región- $\eta$ y en el $j$ -ésimo tamaño de flóculo de la región- $\omega$ , $\text{m/s}$
$k^\circ$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre la región- $\zeta$ y el permeado, $\text{m/s}$
$k^\sigma$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre la región- $\eta$ y la región- $\sigma$ , $\text{m/s}$
$k^\zeta$	Coefficiente interfacial de transferencia de masa para la frontera entre la región- $\eta$ y la región- $\zeta$ , $\text{m/s}$
$K_{ij}$	Constante de equilibrio termodinámico que relaciona a la concentración de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en la región- $e$ y la región- $P_A$ para el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$
$\ell_i$	Longitud característica de la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \eta, \sigma$ ), $\text{m}$
$\mathbf{l}_i$	Vector de la celda unitaria en la dirección $i$ ( $i = 1, 2, 3$ ), $\text{m}$
$L$	Longitud característica del sistema macroscópico, $\text{m}$
$\mathbf{n}_{ij}$	Vector unitario que va dirigido de la fase (o región)- $i$ a la fase (o región)- $j$ ( $i, j = \gamma, \eta, \lambda, \omega, \beta, \sigma, i \neq j$ )
$Pe$	Número de Péclet
$\mathcal{P}_i$	Presión dinámica de la fase (o región)- $i$ ( $i, j = \gamma, \eta, \beta$ ), $\text{kg/m s}^2$
$\mathcal{P}^\sigma$	Promedio intrínseco de la presión dinámica de la fase- $\beta$ dentro de la región- $\sigma$ , $\text{kg/m s}^2$
$\langle \mathcal{P} \rangle$	Presión dinámica local promedio, $\text{kg/m s}^2$
$\langle \mathcal{P}_i \rangle^i$	Promedio intrínseco de la presión dinámica de la fase (o región)- $i$ ( $i, j = \gamma, \eta, \beta$ ), $\text{kg/m s}^2$
$\langle \mathcal{P}^\sigma \rangle^\sigma$	Promedio intrínseco de la presión dinámica de la región- $\sigma$ , $\text{kg/m s}^2$

$\widetilde{\mathcal{P}}_i$	Desviaciones espaciales de la presión dinámica de la fase (o región)- $i$ ( $i, j = \gamma, \eta, \beta$ ), kg/m s <sup>2</sup>
$\widetilde{\mathcal{P}}^\sigma$	Desviaciones espaciales de la presión dinámica de la región- $\sigma$ , kg/m s <sup>2</sup>
$\dot{Q}_{e\eta}$	Flujo volumétrico de entrada de la región- $\eta$ , m <sup>3</sup> /s
$\dot{Q}_{d\gamma}$	Flujo volumétrico de entrada de la fase- $\gamma$ por el difusor, m <sup>3</sup> /s
$\dot{Q}_{s\eta}$	Flujo volumétrico de salida de la región- $\eta$ , m <sup>3</sup> /s
$\dot{Q}_{sup\gamma}$	Flujo volumétrico de salida de la fase- $\gamma$ por la superficie del tanque aerobio, m <sup>3</sup> /s
$r$	Coordenada radial, m
$\mathbf{r}_i$	Vector de posición que localiza puntos de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \beta, \sigma$ ), m
$R_b$	Radio de la burbuja de aire más grande, m
$R_f$	Radio del tamaño de flóculo más grande, m
$Re$	Número de Reynolds para la región- $\eta$ del tanque de membrana
$Re_c$	Número de Reynolds para la región- $\zeta$
$s_i$	Variable de cerradura que mapea $\langle c_A \rangle$ sobre $\tilde{c}_{Ai}$ ( $i = \beta, \eta, \sigma$ )
$t$	Tiempo, s
$t_D$	Tiempo característico de la difusión para la especie $A$ en el tanque de membrana, s
$t_{D_i}$	Tiempo característico de la difusión para la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en el tanque aerobio, s
$\mathbf{v}_{Ai}$	Velocidad de la especie $A$ en la fase (o región)- $i$ ( $i = \beta, \sigma, \zeta$ ), m/s
$\mathbf{v}_{B\gamma}$	Velocidad de la especie $B$ en la fase- $\gamma$ , m/s
$\mathbf{v}_{ef}$	Vector de velocidad efectiva en el casete de ultrafiltración, m/s
$\mathbf{v}_i$	Velocidad de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \omega, \beta$ ), m/s
$\mathbf{v}_{i\eta}$	Velocidad de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en la región- $\eta$ , m/s
$\mathbf{v}_{i\omega j}$	Velocidad de la especie $i$ ( $i = A, B$ ) en el $j$ -ésimo tamaño de flóculo de la región- $\omega$ , m/s
$\mathbf{v}_\sigma$	Velocidad promedio superficial de la fase- $\beta$ dentro de la región- $\sigma$ , m/s
$\mathbf{v}^\sigma$	Velocidad promedio intrínseca de la fase- $\beta$ dentro de la región- $\sigma$ , m/s
$\langle \mathbf{v} \rangle$	Velocidad promedio superficial, m/s
$\langle \mathbf{v}_i \rangle^i$	Velocidad promedio intrínseca de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \sigma, \beta$ ), m/s
$\langle \mathbf{v}_i \rangle_i$	Velocidad promedio superficial de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \sigma, \beta$ ), m/s
$V$	Volumen total de la región de promediado, m <sup>3</sup>
$V_i$	Volumen del dominio de promediado de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \omega, \sigma$ ), m <sup>3</sup>

$\mathcal{V}_i$	Dominio de promediado de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \omega$ )
$w_{ij}$	Velocidad de la frontera entre la región- $i$ y la región (o fase)- $j$ , $i, j = \eta, \gamma, \lambda, \omega$ , $i \neq j$ , m/s
$w_j$	Velocidad de la superficie $\mathcal{A}_j$ , $j = \eta, \gamma$ m/s
$w_{\eta\lambda i}$	Velocidad de la frontera entre la región- $\eta$ a la fase- $\lambda$ en el $i$ -ésimo tamaño de gota, m/s
$w_{\eta\omega j}$	Velocidad de la frontera entre la región- $\eta$ a la región- $\omega$ en el $j$ -ésimo tamaño de flóculo, m/s

### Símbolos griegos

$\alpha$	Parámetro ajustable de la condición de frontera de Beavers-Joseph
$\alpha_{iP_j}$	Constante media de saturación de la especie $i$ en el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ ( $i = A, B$ ), mol/m <sup>3</sup>
$\varepsilon_{ej}$	Fracción volumétrica de la región- $e$ en el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$
$\varepsilon_i$	Fracción volumétrica de la fase (o región)- $i$ ( $i = \gamma, \eta, \beta, \sigma$ )
$\varepsilon_{P_j}$	Fracción volumétrica de la región- $P_i$ en el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ ( $i = A, B$ )
$\mu$	Viscosidad de la fase (o región)- $i$ ( $i = \eta, \sigma, \beta$ ), kg m/s
$\mu_{iP_j}$	Tasa máxima de consumo de la especie $i$ en la región- $P_i$ en el $j$ -ésimo tamaño de la región- $\omega$ ( $i = A, B$ ), mol/m <sup>3</sup> s
$\mu_\gamma$	Viscosidad de la fase- $\gamma$ , kg m/s
$\rho_i$	Densidad de la fase (o región)- $i$ ( $i = \eta, \gamma, \beta$ ), kg/m <sup>3</sup>
$\phi_{\lambda\eta}^2$	Módulo de Thiele en la frontera entre la región- $\lambda$ y la región- $\eta$

### Superíndices

\* Denota cantidades adimensionales

$T$  Transpuesta

## Bibliografía

- Acharya, C., Nakhla, G., Bassi, A. (2006a). A novel two-stage MBR denitrification process for the treatment of high strength pet food wastewater. *Journal of Hazardous Materials* **129**, 194–203.
- Acharya, C., Nakhla, G., Bassi, A. (2006b). Operational optimization and mass balances in a two-stage MBR treating high strength pet food wastewater. *Journal of Environmental Engineering* **132**, 810–817.
- Acharya, C., Nakhla, G., Bassi, A., Kurian, R. (2006c). Treatment of high-strength pet food wastewater using two-stage membrane bioreactors. *Water Environment Research* **78**, 661–670.
- Alex, J., Benedetti, L., Copp, J., Gernaey, K., Jeppsson, U., Nopens, I., Pons, M.N., Rieger, L., Rosen, C., Steyer, J., Vanrolleghem, P., Winkler, S. (2018). Benchmark Simulation Model No. 1 (BSM1).
- Alltec (2019). Alltech Global Feed Survey - Interactive map. <https://www.alltech.com/feed-survey-interactive-map>.
- Amaral, A., Bellandi, G., Rehman, U., Neves, R., Amerlinck, Y., Nopens, I. (2018). Towards improved accuracy in modeling aeration efficiency through understanding bubble size distribution dynamics. *Water Research* **131**, 346–355.

- Amini, E., Mehrnia, M.R., Mousavi, S.M., Mostoufi, N. (2013). Experimental study and computational fluid dynamics simulation of a full-scale membrane bioreactor for municipal wastewater treatment application. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **52**, 9930–9939.
- Beavers, G.S., Joseph, D.D. (1967). Boundary conditions at a naturally permeable wall. *Journal of Fluid Mechanics* **30**, 197–207.
- Becker, P., Abu-Reesh, I., Markossian, S., Antranikian, G., Märkl, H. (1997). Determination of the kinetic parameters during continuous cultivation of the lipase-producing thermophile bacillus sp. IHI-91 on olive oil. *Applied Microbiology and Biotechnology* **48**, 184–190.
- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N. (2002). *Transport phenomena*. John Wiley, New York. segunda edición.
- Boyle-Gotla, A., Jensen, P., Yap, S., Pidou, M., Wang, Y., Batstone, D. (2014). Dynamic multidimensional modelling of submerged membrane bioreactor fouling. *Journal of Membrane Science* **467**, 153–161.
- Brannock, M., Leslie, G., Wang, Y., Buetehorn, S. (2010a). Optimising mixing and nutrient removal in membrane bioreactors: CFD modelling and experimental validation. *Desalination* **250**, 815–818.
- Brannock, M., Wang, Y., Leslie, G. (2010b). Mixing characterisation of full-scale membrane bioreactors: CFD modelling with experimental validation. *Water Research* **44**, 3181–3191.
- Brooksbank, A.M., Latchford, J.W., Mudge, S.M. (2006). Degradation and modification of fats, oils and grease by commercial microbial supplements. *World Journal of Microbiology and Biotechnology* **23**, 977–985.
- Busch, J., Cruse, A., Marquardt, W. (2007). Modeling submerged hollow-fiber membrane filtration for wastewater treatment. *Journal of Membrane Science* **288**, 94–111.
- Cammarota, M., Freire, D. (2006). A review on hydrolytic enzymes in the treatment of wastewater with high oil and grease content. *Bioresource Technology* **97**, 2195–2210.
- Chai, Z., Lu, J., Shi, B., Guo, Z. (2011). Gas slippage effect on the permeability of circular cylinders in a square array. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54**, 3009–3014.

- Changmai, M., Pasawan, M., Purkait, M. (2019). Treatment of oily wastewater from drilling site using electrocoagulation followed by microfiltration. *Separation and Purification Technology* **210**, 463–472.
- Chu, C., Lee, D. (2004a). Multiscale structures of biological flocs. *Chemical Engineering Science* **59**, 1875–1883.
- Chu, C., Lee, D. (2004b). Structural analysis of sludge flocs. *Advanced Powder Technology* **15**, 515–532.
- Clipsham, K. (2018). Sector trend analysis: Pet food trends in Mexico - Global analysis report. <https://www.agr.gc.ca/eng/international-trade/market-intelligence/reports/sector-trend-analysis-pet-food-trends-in-mexico/?id=1534261395271>.
- Cristóvão, R.O., Gonçalves, C., Botelho, C.M., Martins, R.J., Loureiro, J., Boaventura, R.A. (2015). Fish canning wastewater treatment by activated sludge: Application of factorial design optimization. *Water Resources and Industry* **10**, 29–38.
- Cussler, E.L. (2009). *Diffusion: mass transfer in fluid systems*. Cambridge University Press, Cambridge New York.
- d'Antonio, G., Esposito, G., Fabbricino, M., Panico, A. (2016). Modelling the biological processes of MBR treatment plants. *Desalination and Water Treatment* **57**, 22960–22967.
- Das, T., Bandopadhyay, A., Parthasarathy, R., Kumar, R. (1985). Gas - liquid interfacial area in stirred vessels: The effect of an immiscible liquid phase. *Chemical Engineering Science* **40**, 209–214.
- Delgado, S., Villarroel, R., Gonzalez, E., Morales, M. (2011). Aerobic membrane bioreactor for wastewater treatment – Performance under substrate-limited conditions, en: *Biomass - Detection, Production and Usage*. InTech, pp. 265–288.
- Ding, S., Liu, L., Xu, J. (2013). A study of the determination of dimensionless number and its influence on the performance of a combination wastewater reactor. *Procedia Environmental Sciences* **18**, 579–584.

- Do, K.U., Schmitt, F. (2020). Modeling in membranes and membrane-based processes. Scrivener Publishing LLC. capítulo Artificial intelligence model for forecasting of membrane fouling in wastewater treatment by membrane technology. pp. 301–325.
- FAO (2003). Environment protection (standards for effluent discharge) regulations 2003 (g.n. no. 44 of 2003). <https://www.informea.org/en/legislation/environment-protection-standards-effluent-discharge-regulations-2003-gn-no-44-2003>.
- Farahani, M.H.D.A., Rabiee, H., Vatanpour, V., Borghei, S.M. (2015). Fouling reduction of emulsion polyvinylchloride ultrafiltration membranes blended by PEG: The effect of additive concentration and coagulation bath temperature. *Desalination and Water Treatment* **57**, 11931–11944.
- Fenu, A., Guglielmi, G., Jimenez, J., Spèrandio, M., Saroj, D., Lesjean, B., Brepols, C., Thoeue, C., Nopens, I. (2010). Activated sludge model (ASM) based modelling of membrane bioreactor (MBR) processes: A critical review with special regard to MBR specificities. *Water Research* **44**, 4272–4294.
- Fernández, A., Sánchez, A., Font, X. (2005). Anaerobic co-digestion of a simulated organic fraction of municipal solid wastes and fats of animal and vegetable origin. *Biochemical Engineering Journal* **26**, 22–28.
- Garcia-Ochoa, F., Gomez, E., Santos, V.E., Merchuk, J.C. (2010). Oxygen uptake rate in microbial processes: An overview. *Biochemical Engineering Journal* **49**, 289–307.
- GE (2014). Operation & Maintenance Manual, Proyect: U-500615. GE Power & Water.
- Girard, J.E. (2005). *Principles of Environmental Chemistry*. Jhones and Bartlett Publishers, London.
- Goli, A., Shamiri, A., Khosroyar, S., Talaiekhosani, A., Sanaye, R., Azizi, K. (2019). A review on different aerobic and anaerobic treatment methods in dairy industry wastewater. *Journal of Environmental Treatment Techniques* **6**, 113–141.
- Gray, W.G. (1975). A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science* **30**, 229–233.
- Gray, W.G., Gray, G.A. (2017). *Introduction to Environmental Modeling*. Cambridge University Press.

- Gukelberger, E., Gabriele, B., Hoinkis, J., Figoli, A. (2019). MBR and integration with renewable energy toward suitable autonomous wastewater treatment, en: *Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes*. Elsevier, pp. 355–384.
- Hamed, H., Ehteshami, M., Mirbagheri, S.A., Rasouli, S.A., Zendejboudi, S. (2019). Current status and future prospects of membrane bioreactors (MBRs) and fouling phenomena: A systematic review. *The Canadian Journal of Chemical Engineering* **97**, 32–58.
- Hamza, R.A., Iorhemen, O.T., Tay, J.H. (2016). Advances in biological systems for the treatment of high-strength wastewater. *Journal of Water Process Engineering* **10**, 128–142.
- Hauduc, H., Rieger, L., Oehmen, A., van Loosdrecht, M., Comeau, Y., Héduit, A., Vanrolleghem, P., Gillot, S. (2012). Critical review of activated sludge modeling: State of process knowledge, modeling concepts, and limitations. *Biotechnology and Bioengineering* **110**, 24–46.
- Howes, F.A., Whitaker, S. (1985). The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science* **40**, 1387–1392.
- Hsu, T.C., Hanaki, K., Matsumoto, J. (1983). Kinetics of hydrolysis, oxidation, and adsorption during olive oil degradation by activated sludge. *Biotechnology and Bioengineering* **25**, 1829–1839.
- Hu, H.H. (2012). Computational Fluid Dynamics, en: *Fluid Mechanics*. Elsevier, pp. 421–472.
- Huang, X., Mi, W., Hong, N., Ito, H., Kawagoshi, Y. (2020). Efficient transition from partial nitrification to partial nitrification/anammox in a membrane bioreactor with activated sludge as the sole seed source. *Chemosphere* **253**, 126719.
- INEGI (2017). México - encuesta anual de la industria manufacturera 2016-2017, información 2015-2016. <http://www3.inegi.org.mx/rnm/index.php/catalog/311>.
- Iorhemen, O., Hamza, R., Tay, J. (2016). Membrane bioreactor (MBR) technology for wastewater treatment and reclamation: Membrane fouling. *Membranes* **6**, 33.
- Itokawa, H., Thiemig, C., Pinnekamp, J. (2008). Design and operating experiences of municipal MBRs in Europe. *Water Science and Technology* **58**, 2319–2327.

- Janus, T. (2014). Integrated mathematical model of a MBR reactor including biopolymer kinetics and membrane fouling. *Procedia Engineering* **70**, 882–891.
- Janus, T., Ulanicki, B. (2015). ASM1-based activated sludge model with biopolymer kinetics for integrated simulation of membrane bioreactors for wastewater treatment. *Procedia Engineering* **119**, 1318–1327.
- Janus, T., Ulanicki, B. (2016). Integrated benchmark simulation model of an immersed membrane bioreactor. *Process Safety and Environmental Protection* **104**, 24–37.
- Javed, S., Azeem, F., Hussain, S., Rasul, I., Siddique, M.H., Riaz, M., Afzal, M., Kouser, A., Nadeem, H. (2018). Bacterial lipases: A review on purification and characterization. *Progress in Biophysics and Molecular Biology* **132**, 23–34.
- Jeganathan, J., Bassi, A., Nakhla, G. (2006). Pre-treatment of high oil and grease pet food industrial wastewaters using immobilized lipase hydrolyzation. *Journal of Hazardous Materials* **137**, 121–128.
- Jeganathan, J., Nakhla, G., Bassi, A. (2007). Hydrolytic pretreatment of oily wastewater by immobilized lipase. *Journal of Hazardous Materials* **145**, 127–135.
- Jeppsson, U. (1996). *Modelling aspects of wastewater treatment processes*. Tesis de doctorado. Lund Institute of Technology.
- Jeppsson, U., Rosen, C., Alex, J., Copp, J., Gernaey, K., Pons, M.N., Vanrolleghem, P. (2006). Towards a benchmark simulation model for plant-wide control strategy performance evaluation of WWTPs. *Water Science and Technology* **53**, 287–295.
- Ji, X., Chen, G., Zhang, Q., Lin, L., Wei, Y. (2015). Purification and characterization of an extracellular cold-adapted alkaline lipase produced by psychrotrophic bacterium *Yersinia enterocolitica* strain KM1. *Journal of Basic Microbiology* **55**, 718–728.
- Jiang, T. (2007). *Characterization and modelling of soluble microbial products in membrane bioreactors*. Tesis de doctorado. Ghent University.
- Jin, J.M. (2014). *The finite element method in electromagnetics*. John Wiley & Sons. 3rd edición.

- Judd, S. (2010). *The MBR book : principles and applications of membrane bioreactors for water and wastewater treatment*. Butterworth-Heinemann, Oxford.
- Khakpour, S., Renzo, A.D., Curcio, E., Maio, F.P.D., Giorno, L., Bartolo, L.D. (2017). Oxygen transport in hollow fibre membrane bioreactors for hepatic 3D cell culture: A parametric study. *Journal of Membrane Science* **544**, 312–322.
- Khuntia, H.K., Janardhana, N., Chanakya, H.N. (2020). Fractionation of FOG (fat, oil, grease), wastewater and particulate solids based on low-temperature solidification and stirring. *Journal of Water Process Engineering* **34**, 101167.
- Krzeminski, P., Leverette, L., Malamis, S., Katsou, E. (2017). Membrane bioreactors – A review on recent developments in energy reduction, fouling control, novel configurations, LCA and market prospects. *Journal of Membrane Science* **527**, 207–227.
- Kurian, R., Acharya, C., Nakhla, G., Bassi, A. (2005). Conventional and thermophilic aerobic treatability of high strength oily pet food wastewater using membrane-coupled bioreactors. *Water Research* **39**, 4299–4308.
- Kurian, R., Nakhla, G., Bassi, A. (2006). Biodegradation kinetics of high strength oily pet food wastewater in a membrane-coupled bioreactor (MBR). *Chemosphere* **65**, 1204–1211.
- Laplace, P.S. (1805). *Traité de mécanique céleste*. volumen 4. De L’Imprimerie de Crapelet, Courcier, Paris, France.
- Lasseux, D., Arani, A.A.A., Ahmadi, A. (2011). On the stationary macroscopic inertial effects for one phase flow in ordered and disordered porous media. *Physics of Fluids* **23**, 073103.
- Lee, Y., Cho, J., Seo, Y., Lee, J.W., Ahn, K.H. (2002). Modeling of submerged membrane bioreactor process for wastewater treatment. *Desalination* **146**, 451–457.
- Lefebvre, X., Paul, E., Mauret, M., Baptiste, P., Capdeville, B. (1998). Kinetic characterization of saponified domestic lipid residues aerobic biodegradation. *Water Research* **32**, 3031–3038.
- Liang, S., Song, L., Tao, G., Kekre, K.A., Seah, H. (2006). A modeling study of fouling development in membrane bioreactors for wastewater treatment. *Water Environment Research* **78**, 857–864.

- Liu, L.V., Nakhla, G., Bassi, A. (2004a). The treatability study of high strength pet food wastewater: A continuous flow aerobic system performance evaluation. *Environmental Technology* **25**, 577–588.
- Liu, M., Yang, M., Chen, M., Yu, D., Zheng, J., Chang, J., Wang, X., Ji, C., Wei, Y. (2018). Numerical optimization of membrane module design and operation for a full-scale submerged MBR by computational fluid dynamics. *Bioresource Technology* **269**, 300–308.
- Liu, V.L., Nakhla, G., Bassi, A. (2004b). Treatability and kinetics studies of mesophilic aerobic biodegradation of high oil and grease pet food wastewater. *Journal of Hazardous Materials* **112**, 87–94.
- Liu, V.L., Nakhla, G., Bassi, A., Al-Sabawi, M. (2003). Comparative evaluation of aerobic and anaerobic treatment of high oil and grease rendering wastewater. *Proceedings of the Water Environment Federation* **10**, 157–169.
- Lu, S., Imai, T., Ukita, M., Sekine, M., Higuchi, T., Fukagawa, M. (2001). A model for membrane bioreactor process based on the concept of formation and degradation of soluble microbial products. *Water Research* **35**, 2038–2048.
- Maere, T., Verrecht, B., Moerenhout, S., Judd, S., Nopens, I. (2011). BSM-MBR: A benchmark simulation model to compare control and operational strategies for membrane bioreactors. *Water Research* **45**, 2181–2190.
- Mannina, G., Bella, G.D. (2012). Comparing two start-up strategies for MBRs: Experimental study and mathematical modelling. *Biochemical Engineering Journal* **68**, 91–103.
- Mannina, G., Bella, G.D., Viviani, G. (2011). An integrated model for biological and physical process simulation in membrane bioreactors (MBRs). *Journal of Membrane Science* **376**, 56–69.
- Mannina, G., Cosenza, A. (2015). Quantifying sensitivity and uncertainty analysis of a new mathematical model for the evaluation of greenhouse gas emissions from membrane bioreactors. *Journal of Membrane Science* **475**, 80–90.
- Mannina, G., Cosenza, A., Ekama, G.A. (2018). A comprehensive integrated membrane bioreactor model for greenhouse gas emissions. *Chemical Engineering Journal* **334**, 1563–1572.

- Metcalf, Eddy (2003). *Wastewater engineering: Treatment and reuse*. McGraw-Hill.
- Mines, R.O. (2019). Oxygen transfer parameters and oxygen uptake rates revisited. *Journal of Environmental Science and Health, Part A* **55**, 345–353.
- Mobarak-Qamsari, E., Kasra-Kermanshahi, R., Nosrati, M., Amani, T. (2012). Enzymatic pre-hydrolysis of high fat content dairy wastewater as a pretreatment for anaerobic digestion. *International Journal of Environmental Research* **6**, 475–480.
- Moilanen, P., Laakkonen, M., Aittamaa, J. (2005). Modelling fermenters with CFD. *Computer Aided Chemical Engineering* **20**, 709–714.
- Morgenroth, E., Arvin, E., Vanrolleghem, P. (2002). The use of mathematical models in teaching wastewatertreatment engineering. *Water Science and Technology* **45**, 229–233.
- Naessens, W., Maere, T., Nopens, I. (2012a). Critical review of membrane bioreactor models – part 1: Biokinetic and filtration models. *Bioresource Technology* **122**, 95–106.
- Naessens, W., Maere, T., Ratkovich, N., Vedantam, S., Nopens, I. (2012b). Critical review of membrane bioreactor models – part 2: Hydrodynamic and integrated models. *Bioresource Technology* **122**, 107–118.
- Nakhla, G., Al-Sabawi, M., Bassi, A., Liu, V. (2003). Anaerobic treatability of high oil and grease rendering wastewater. *Journal of Hazardous Materials* **102**, 243–255.
- Nakhla, G., Liu, V., Bassi, A. (2006). Kinetic modeling of aerobic biodegradation of high oil and grease rendering wastewater. *Bioresource Technology* **97**, 131–139.
- Navier, M. (1822). *Mémoire sur les lois du mouvement des fluides*. l'Académie Royale des Sciences.
- Ng, A.N., Kim, A.S. (2007). A mini-review of modeling studies on membrane bioreactor (MBR) treatment for municipal wastewaters. *Desalination* **212**, 261–281.
- Nield, D.A., Bejan, A. (2012). *Convection in porous media*. Springer-Verlag GmbH.
- Ochoa-Tapia, J., Whitaker, S. (1995). Momentum transfer at the boundary between a porous medium and a homogeneous fluid—I. Theoretical development. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **38**, 2635–2646.

- Oliveira-Esquerre, K.P., Narita, H., Yamato, N., Funamizu, N., Watanabe, Y. (2006). Incorporation of the concept of microbial product formation into ASM3 and the modeling of a membrane bioreactor for wastewater treatment. *Brazilian Journal of Chemical Engineering* **23**, 461–471.
- Orsavova, J., Misurcova, L., Ambrozova, J., Vicha, R., Mlcek, J. (2015). Fatty acids composition of vegetable oils and its contribution to dietary energy intake and dependence of cardiovascular mortality on dietary intake of fatty acids. *International Journal of Molecular Sciences* **16**, 12871–12890.
- Ratkovich, N., Hunze, M., Nopens, I. (2012). Hydrodynamic study of a hollow fiber membrane system using experimentally and numerically derived surface shear stresses. *Multiphase Science and Technology* **24**, 47–66.
- Rayleigh, L. (1892). LVI. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **34**, 481–502.
- Rittmann, B.E., Boltz, J.P., Brockmann, D., Daigger, G.T., Morgenroth, E., Sørensen, K.H., Takács, I., van Loosdrecht, M., Vanrolleghem, P.A. (2018). A framework for good biofilm reactor modeling practice (GBRMP). *Water Science and Technology* **77**, 1149–1164.
- Saalbach, J., Hunze, M. (2008). Flow structures in MBR-tanks. *Water Science and Technology* **57**, 699–705.
- Sánchez, F., Rey, H., Viedma, A., Nicolás-Pérez, F., Kaiser, A., Martínez, M. (2018). CFD simulation of fluid dynamic and biokinetic processes within activated sludge reactors under intermittent aeration regime. *Water Research* **139**, 47–57.
- Santonja, G.G., Karlis, P., Stubdrup, K.R., Brinkmann, T., Roudier, S. (2019). *Best Available Techniques (BAT) reference document for the food, drink and milk industries*. Reporte técnico. Industrial Emissions Directive of the European Commission (Integrated Pollution Prevention and Control).
- de los Santos-Sánchez, R., Valdés-Parada, F.J., Chirino, Y.I. (2016). Upscaling diffusion and reaction processes in multicellular systems considering different cell populations. *Chemical Engineering Science* **142**, 144–164.

- Satriajaya, A. (2017). *The Water and Land Footprint of Pets*. Techreport. University of Twente.
- SEMARNAT (2018). PROY- NOM-001-SEMARNAT-2017, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación. SEMARNAT.
- Shen, L.G., Lei, Q., Chen, J.R., Hong, H.C., He, Y.M., Lin, H.J. (2015). Membrane fouling in a submerged membrane bioreactor: Impacts of floc size. *Chemical Engineering Journal* **269**, 328–334.
- Singh, R. (2005). Chapter 3 - Hybrid membrane systems – applications and case studies, en: Singh, R. (Ed.), *Membrane Technology and Engineering for Water Purification*. Elsevier Science, Amsterdam, pp. 131–196.
- Skoneczny, S., Cioch, M. (2018). Determination of steady-states in a tubular biofilm bioreactor with axial dispersion. *Chemical Engineering Research and Design* **136**, 468–476.
- Smith, K., Guo, S., Zhu, Q., Dong, X., Liu, S. (2019). An evaluation of the environmental benefit and energy footprint of china's stricter wastewater standards: Can benefit be increased? *Journal of Cleaner Production* **219**, 723–733.
- Spérandio, M., Masse, A., Espinosa-Bouchot, M., Cabassud, C. (2005). Characterization of sludge structure and activity in submerged membrane bioreactor. *Water Science and Technology* **52**, 401–408.
- Statista (2018). Pet food: Mexico - Statista market forecast. <https://www.statista.com/outlook/40130000/116/pet-food/mexico>.
- SUEZ (2020). ZeeWeed\* 500D Module. SUEZ: Water Technologies & Solutions.
- Takács, I., Dold, P., Morgenroth, E., Boltz, J., Schraa, O., Belia, E., Shaw, A., Wett, B., Jones, R., Comeau, Y. (2011). Nutrient removal—Manual of practice no. 34. Water Environment Federation, McGraw-Hill. capítulo Structured process models for nutrient removal. pp. 356–486.
- Teng, J., Shen, L., Xu, Y., Chen, Y., Wu, X.L., He, Y., Chen, J., Lin, H. (2020). Effects of molecular

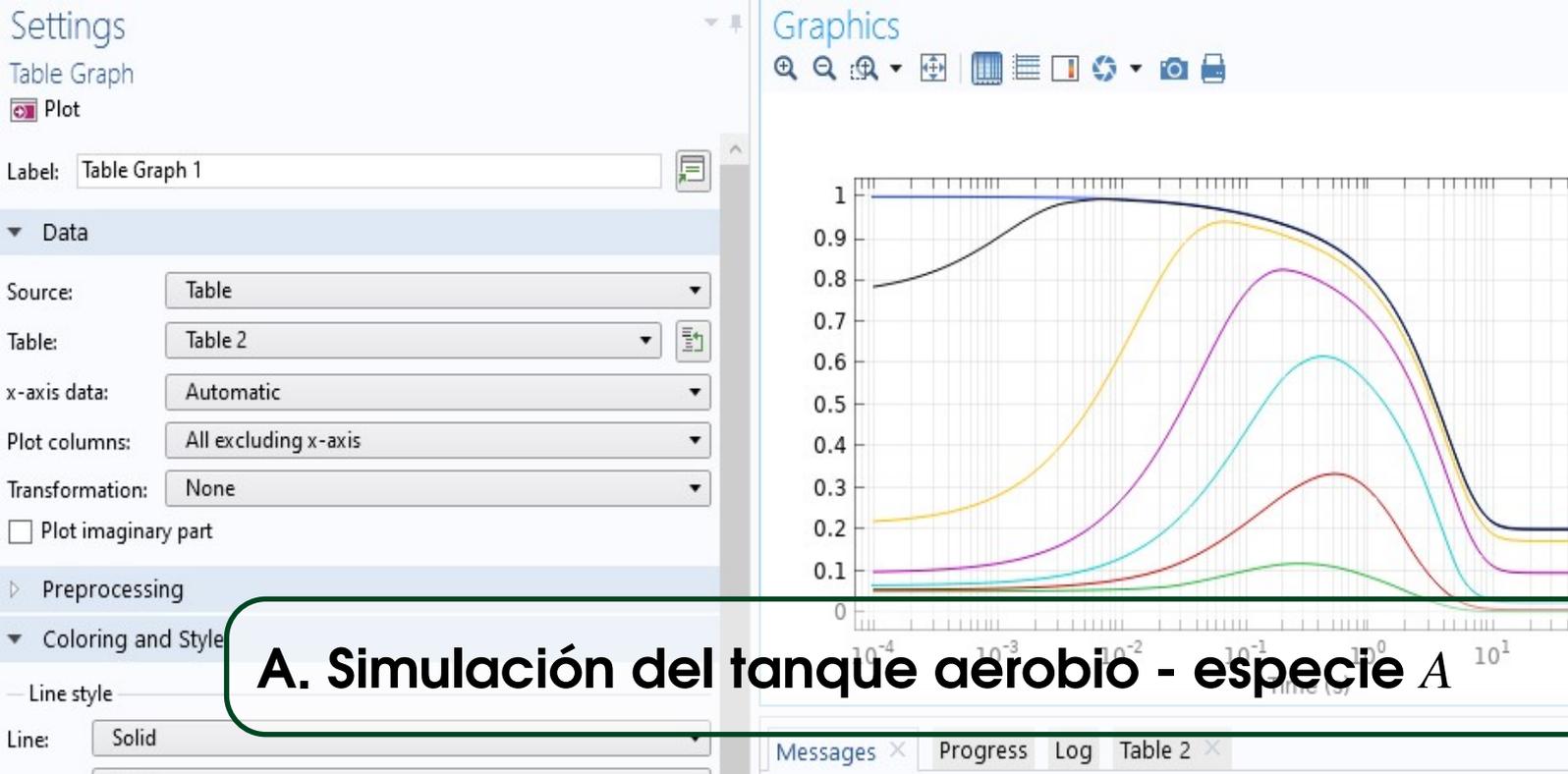
- weight distribution of soluble microbial products (SMPs) on membrane fouling in a membrane bioreactor (MBR): Novel mechanistic insights. *Chemosphere* **248**, 126013.
- Tenore, A., Vieira, J., Frunzo, L., Luongo, V., Fabbicino, M. (2018). Calibration and validation of an activated sludge model for membrane bioreactor wastewater treatment plants. *Environmental Technology* **41**, 1923–1936.
- Valdés-Parada, F., Alvarez-Ramirez, J., Ochoa-Tapia, J. (2005). An approximate solution for a transient two-phase stirred tank bioreactor with nonlinear kinetics. *Biotechnology Progress* **21**, 1420–1428.
- Valdés Parada, F.J. (2014). *Breviario sobre modelado matemático*. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Villadsen, J. (2016). *Fundamental Bioengineering*. John Wiley and Sons, Inc, Singapore.
- Wakelin, N., Forster, C. (1997). An investigation into microbial removal of fats, oils and greases. *Bioresource Technology* **59**, 37–43.
- Wall, T. (2018). Mexican pet food market's volume and value grew in 2017. <https://www.petfoodindustry.com/articles/7246-mexican-pet-food-markets-volume-and-value-grew-in-2017?v=preview>.
- Wallace, T., Gibbons, D., O'Dwyer, M., Curran, T.P. (2017). International evolution of fat, oil and grease (FOG) waste management – a review. *Journal of Environmental Management* **187**, 424–435.
- Wang, L.K., Hung, Y.T., Lo, H.H., Yapijakis, C. (Eds.) (2005). *Waste treatment in the food processing industry*. CRC Press.
- Wang, S.J., Zhong, J.J. (2007). Bioreactor engineering, en: *Bioprocessing for value-added products from renewable resources*. Elsevier, pp. 131–161.
- Wang, Y., Brannock, M., Leslie, G. (2009). Membrane bioreactors: Overview of the effects of module geometry on mixing energy. *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering* **4**, 322–333.
- Whitaker, S. (1996). The Forchheimer equation: A theoretical development. *Transport in Porous Media* **25**, 27–61.

- Whitaker, S. (1999). *The Method of Volume Averaging*. Springer Netherlands, Dordrecht.
- Wicklein, E., Batstone, D.J., Ducoste, J., Laurent, J., Griborio, A., Wicks, J., Saunders, S., Samstag, R., Potier, O., Nopens, I. (2015). Good modelling practice in applying computational fluid dynamics for WWTP modelling. *Water Science and Technology* **73**, 969–982.
- Wintgens, T. (2003). Modelling of a membrane bioreactor system for municipal wastewater treatment. *Journal of Membrane Science* **216**, 55–65.
- Wood, B.D. (2009). The role of scaling laws in upscaling. *Advances in Water Resources* **32**, 723–736.
- Wood, B.D., Whitaker, S. (2000). Multi-species diffusion and reaction in biofilms and cellular media. *Chemical Engineering Science* **55**, 3397–3418.
- Wu, J., He, C., Zhang, Y. (2012). Modeling membrane fouling in a submerged membrane bioreactor by considering the role of solid, colloidal and soluble components. *Journal of Membrane Science* **397-398**, 102–111.
- Xiao, K., Liang, S., Wang, X., Chen, C., Huang, X. (2019). Current state and challenges of full-scale membrane bioreactor applications: A critical review. *Bioresource Technology* **271**, 473–481.
- Xiea, S., I.Haia, F., Zhanb, X., Guoc, W., Ngoc, H.H., Pricea, W.E., Nghiem, L.D. (2016). Anaerobic co-digestion: A critical review of mathematical modelling for performance optimization. *Bioresource Technology* **222**, 498–512.
- Young, T. (1805). III. An essay on the cohesion of fluids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **95**, 65–87.
- Zarragoitia-González, A., Schetrite, S., Alliet, M., Jáuregui-Haza, U., Albasi, C. (2008). Modelling of submerged membrane bioreactor: Conceptual study about link between activated sludge biokinetics, aeration and fouling process. *Journal of Membrane Science* **325**, 612–624.
- Zheng, Q.Z., Wang, P., Yang, Y.N., Cui, D.J. (2006). The relationship between porosity and kinetics parameter of membrane formation in PSF ultrafiltration membrane. *Journal of Membrane Science* **286**, 7–11.

---

Zhou, Y., Duan, N., Wu, X., Fang, H. (2018). COD discharge limits for urban wastewater treatment plants in china based on statistical methods. *Water* **10**, 777.

Zuthi, M.F.R., Guo, W., Ngo, H.H., Nghiem, D.L., Hai, F.I., Xia, S., Li, J., Li, J., Liu, Y. (2017). New and practical mathematical model of membrane fouling in an aerobic submerged membrane bioreactor. *Bioresource Technology* **238**, 86–94.



## A. Simulación del tanque aerobio - especie A

1. En Model Wizard seleccione 1D y elija por sextuplicado *Mathematics/PDE Interfaces/Coefficient Form PDE*; en *Dependent variables* escriba la concentración como  $up$  en el primero,  $up2$  en el segundo,  $up3$  en el tercero,  $up4$  en el cuarto,  $up5$  en el quinto y  $up6$  en el sexto *Coefficient Form PDE*. Presione el botón *Add*. Elija ahora *Mathematics/ODE and DAE Interfaces/Domain ODEs and DAEs*; en *Dependent variables* escriba la concentración como  $uf$ . Presione el botón *Add* seguido por *Study* y seleccione *Time dependent*; por último presione el botón *Done*.
2. En *Parameters* escriba:

$$Bi = 1, \quad til = 0.15, \quad aeo = 0.9, \quad ael = 0.8, \quad Ee = 0.7, \quad Ep = 0.25, \quad K = 1, \\ M = 9, \quad alfa = 0.003, \quad Eeta = 0.85, \quad Qe = 0.00003, \quad k = 0.25 \quad Ce = 0.35$$

3. En *Geometry* seleccione por sextuplicado la opción de *Interval*
  - En *Interval 1* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 1$ .
  - En *Interval 2* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.82$ .
  - En *Interval 3* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.64$ .
  - En *Interval 4* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.45$ .
  - En *Interval 5* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.27$ .

- En *Interval 6* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.09$ .

Haga click en *Build All Objects*.

4. En *Definitions* seleccione por sextuplicado: *Nonlocal Couplings* y *Average*.

- En la sección de *Operator name* de *Average 1* escriba *ave1* y seleccione el punto donde  $r = 1$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 2* escriba *ave2* y seleccione el punto donde  $r = 0.82$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 3* escriba *ave3* y seleccione el punto donde  $r = 0.64$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 4* escriba *ave4* y seleccione el punto donde  $r = 0.45$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 5* escriba *ave5* y seleccione el punto donde  $r = 0.27$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 6* escriba *ave6* y seleccione el punto donde  $r = 0.09$ .

5. En *Definitions/Variables 1* escriba lo siguiente:

- $DA = (3 * k - 2 * Ee * (k - 1)) / (3 + Ee * (k - 1))$
- $cpi = ave1(up)$
- $cpi2 = ave2(up2)$
- $cpi3 = ave3(up3)$
- $cpi4 = ave4(up4)$
- $cpi5 = ave5(up5)$
- $cpi6 = ave6(up6)$

6. En *Coefficient Form PDE/Coefficient Form PDE 1* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 1$  e introduzca lo siguiente:

- $c = x^2 * DA$
- $a = 0$
- $f = -((x^2)) * (Ep * M * up / (up + alfa))$
- $e_a = 0$
- $d = (Ep/K + Ee) * (x^2)$

7. En *Coefficient Form PDE/Zero Flux 1* seleccione el punto donde  $r = 0$ .

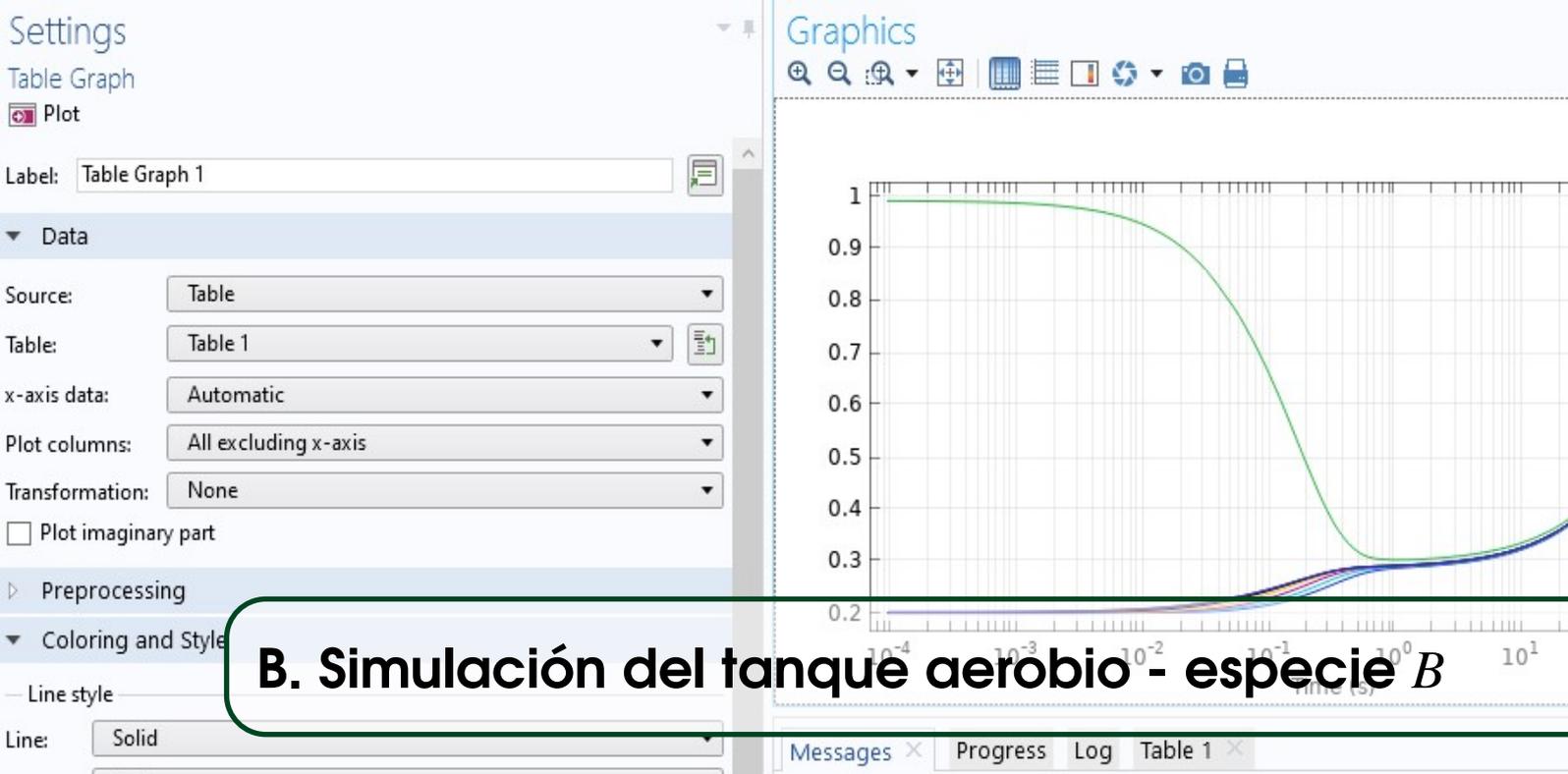
8. En *Coefficient Form PDE/Initial Values 1* seleccione el intervalo y defina  $up = 0.05$  y  $\frac{\partial up}{\partial r} = 0$ .
9. En *Coefficient Form PDE* seleccione *Flux/Source*, seleccione el punto donde  $r = 1$  y defina  $g = Bi * (uf - up)$ .
10. Para *Coefficient Form PDE 2* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.82$  y sustituyendo a  $up$  por  $up2$  y a  $cpi$  por  $cpi2$ .
11. Para *Coefficient Form PDE 3* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.64$  y sustituyendo a  $up$  por  $up3$  y a  $cpi$  por  $cpi3$ .
12. Para *Coefficient Form PDE 4* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.45$  y sustituyendo a  $up$  por  $up4$  y a  $cpi$  por  $cpi4$ .
13. Para *Coefficient Form PDE 5* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.27$  y sustituyendo a  $up$  por  $up5$  y a  $cpi$  por  $cpi5$ .
14. Para *Coefficient Form PDE 6* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.09$  y sustituyendo a  $up$  por  $up6$  y a  $cpi$  por  $cpi6$ .
15. En *Domain ODEs and DAEs/Distributed ODE 1* seleccione todo el intervalo y defina:
  - $f = Qe/Eeta * (Ce - uf) - 0.1239 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi) + ael * til/Eeta - 0.2916 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi2) - 0.3552 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi3) - 0.1882 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi4) - 0.0406 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi5) - 0.0005022 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi6)$
  - $d_a = 1$
  - $e_a = 0$
16. En *Domain ODEs and DAEs/Initial Values 1* seleccione todo el intervalo y defina  $uf = 1$  y  $\frac{\partial uf}{\partial r} = 0$ .
17. En *Mesh 1* seleccione *Edge*, y en éste último seleccione *Size*. En la sección de *Element size* seleccione *Custom*, active la casilla de *Maximum element size* y escriba 0.001. Haga click en *Build all*.
18. En *Study 1*, en la sección de *Time* coloque el siguiente intervalo de valores en modalidad logarítmica:
  - Start:  $1e - 4$
  - Stop: 1000
  - Steps per decade: 100

Presione el botón *Replace*.

19. Haga click en *Compute*.

20. En *Results/Derived Values* seleccione *Average/Line Average*, así como *Point Evaluation* y por quintuplicado *Integration/Line Integration*.

- En *Line Average 1* escriba la expresión  $uf$  y  $3 * up * x^2$  y seleccione todo el intervalo.
- En *Point Evaluation 1* escriba la expresión  $up$  y seleccione el punto donde  $r = 1$ .
- En *Line Integration 1* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.82$  y escriba la expresión  $5.44 * up^2 * x^2$ .
- En *Line Integration 2* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.64$  y escriba la expresión  $11.44 * up^3 * x^2$ .
- En *Line Integration 3* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.45$  y escriba la expresión  $32.92 * up^4 * x^2$ .
- En *Line Integration 4* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.27$  y escriba la expresión  $152.42 * up^5 * x^2$ .
- En *Line Integration 5* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.09$  y escriba la expresión  $4115.23 * up^6 * x^2$ . Evalúe todas las secciones.



## B. Simulación del tanque aerobio - especie B

1. En Model Wizard seleccione 1D y elija por sextuplicado *Mathematics/PDE Interfaces/Coefficient Form PDE*; en *Dependent variables* escriba la concentración como  $up$  en el primero,  $up2$  en el segundo,  $up3$  en el tercero,  $up4$  en el cuarto,  $up5$  en el quinto y  $up6$  en el sexto *Coefficient Form PDE*. Presione el botón *Add*. Elija ahora por duplicado *Mathematics/ODE and DAE Interfaces/Domain ODEs and DAEs*; en *Dependent variables* escriba la concentración como  $uf$  para *Domain ODEs and DAEs* y  $ug$  para *Domain ODEs and DAEs*
2. Presione el botón *Add* seguido por *Study* y seleccione *Time dependent*; por último presione el botón *Done*.
2. En *Parameters* escriba:

$$\begin{aligned}
 aeg &= 0.7, & aeo &= 0.9, & alfa &= 0.001, & Bi &= 5, & Bige &= 1, & Ee &= 0.7, \\
 Eeta &= 0.85, & Eg &= 0.12, & Ep &= 0.28, & k &= 0.25, & K &= 1, & M &= 0.08, \\
 Qd &= 0.01, & Qe &= 0.00003356
 \end{aligned}$$

3. En *Geometry* seleccione por sextuplicado la opción de *Interval*
  - En *Interval 1* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 1$ .
  - En *Interval 2* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.82$ .
  - En *Interval 3* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.64$ .

- En *Interval 4* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.45$ .
- En *Interval 5* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.27$ .
- En *Interval 6* introduzca un intervalo que vaya de  $r = 0$  a  $r = 0.09$ .

Haga click en *Build All Objects*.

4. En *Definitions* seleccione por sextuplicado: *Nonlocal Couplings* y *Average*.

- En la sección de *Operator name* de *Average 1* escriba *ave1* y seleccione el punto donde  $r = 1$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 2* escriba *ave2* y seleccione el punto donde  $r = 0.82$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 3* escriba *ave3* y seleccione el punto donde  $r = 0.64$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 4* escriba *ave4* y seleccione el punto donde  $r = 0.45$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 5* escriba *ave5* y seleccione el punto donde  $r = 0.27$ .
- En la sección de *Operator name* de *Average 6* escriba *ave6* y seleccione el punto donde  $r = 0.09$ .

5. En *Definitions/Variables 1* escriba lo siguiente:

- $DA = (3 * k - 2 * Ee * (k - 1)) / (3 + Ee * (k - 1))$
- $cpi = ave1(up)$
- $cpi2 = ave2(up2)$
- $cpi3 = ave3(up3)$
- $cpi4 = ave4(up4)$
- $cpi5 = ave5(up5)$
- $cpi6 = ave6(up6)$

6. En *Coefficient Form PDE/Coefficient Form PDE 1* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 1$  e introduzca lo siguiente:

- $c = x^2 * DA$
- $a = 0$
- $f = -((x^2)) * (Ep * M * up / (up + alfa))$
- $e_a = 0$

- $d = (Ep/K + Ee) * (x^2)$
- 7. En *Coefficient Form PDE/Zero Flux 1* seleccione el punto donde  $r = 0$ .
- 8. En *Coefficient Form PDE/Initial Values 1* seleccione el intervalo y defina  $up = 0.2$  y  $\frac{\partial up}{\partial t} = 0$ .
- 9. En *Coefficient Form PDE* seleccione *Flux/Source*, seleccione el punto donde  $r = 1$  y defina  $g = Bi * (uf - up)$ .
- 10. Para *Coefficient Form PDE 2* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.82$  y sustituyendo a  $up$  por  $up2$  y a  $cpi$  por  $cpi2$ .
- 11. Para *Coefficient Form PDE 3* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.64$  y sustituyendo a  $up$  por  $up3$  y a  $cpi$  por  $cpi3$ .
- 12. Para *Coefficient Form PDE 4* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.45$  y sustituyendo a  $up$  por  $up4$  y a  $cpi$  por  $cpi4$ .
- 13. Para *Coefficient Form PDE 5* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.27$  y sustituyendo a  $up$  por  $up5$  y a  $cpi$  por  $cpi5$ .
- 14. Para *Coefficient Form PDE 6* repita los pasos 6-9, seleccionando el punto donde  $r = 0.09$  y sustituyendo a  $up$  por  $up6$  y a  $cpi$  por  $cpi6$ .
- 15. En *Domain ODEs and DAEs/Distributed ODE 1* seleccione todo el intervalo y defina:
  - $-Qe/Eeta * uf - 0.1239 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi) - 0.2916 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi2) - 0.3552 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi3) - 0.1882 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi4) - 0.0406 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi5) - 0.0005022 * aeo * Bi/Eeta * (uf - cpi6) - aeg * Bige/Eeta * (uf - ug)$
  - $d_a = 1$
  - $e_a = 0$
- 16. En *Domain ODEs and DAEs 2/Initial Values 1* seleccione todo el intervalo y defina  $uf = 0.2$  y  $\frac{\partial uf}{\partial t} = 0$ .
- 17. En *Domain ODEs and DAEs 2/Distributed ODE 1* seleccione todo el intervalo y defina:
  - $Qd/Eg * (1 - ug) - aeg * Bige/Eg * (ug - uf)$
  - $d_a = 1$
  - $e_a = 0$
- 18. En *Domain ODEs and DAEs/Initial Values 1* seleccione todo el intervalo y defina  $ug = 1$  y  $\frac{\partial uf}{\partial t} = 0$ .
- 19. En *Mesh 1* seleccione *Edge*, y en éste último seleccione *Size*. En la sección de *Element size*

seleccione *Custom*, active la casilla de *Maximum element size* y escriba 0.001. Haga click en *Build all*.

20. En *Study 1*, en la sección de *Time* coloque el siguiente intervalo de valores en modalidad logarítmica:

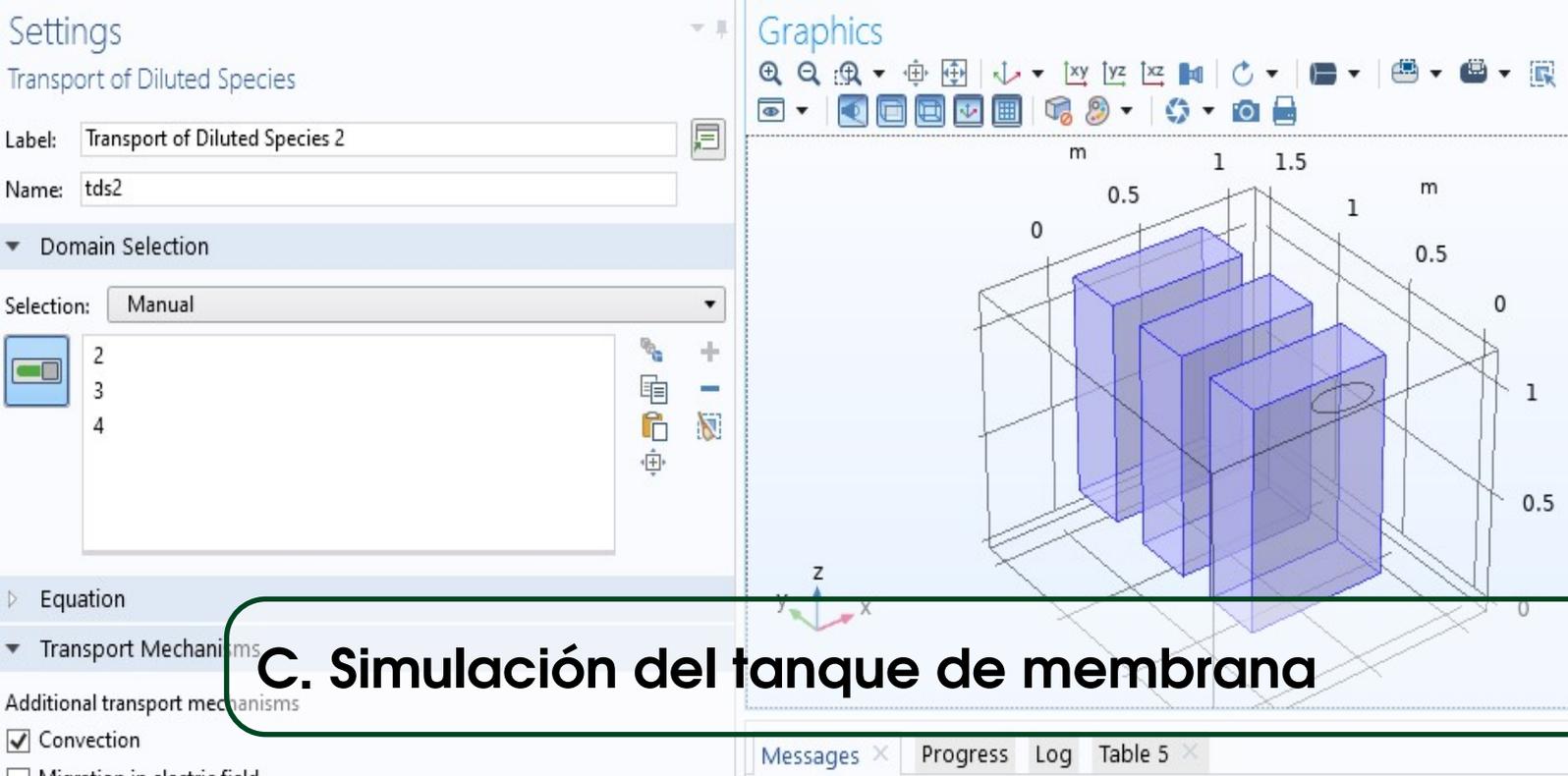
- Start:  $1e - 4$
- Stop: 1000
- Steps per decade: 100

Presione el botón *Replace*.

21. Haga click en *Compute*.

22. En *Results/Derived Values* seleccione *Average/Line Average* y por quintuplicado seleccione *Integration/Line Integration*.

- En *Line Average 1* escriba la expresión  $uf, ug$  y  $3 * up * x^2$  y seleccione todo el intervalo.
- En *Line Integration 1* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.82$  y escriba la expresión  $5.44 * up2 * x^2$ .
- En *Line Integration 2* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.64$  y escriba la expresión  $11.44 * up3 * x^2$ .
- En *Line Integration 3* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.45$  y escriba la expresión  $32.92 * up4 * x^2$ .
- En *Line Integration 4* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.27$  y escriba la expresión  $152.42 * up5 * x^2$ .
- En *Line Integration 5* seleccione el intervalo que va de  $r = 0$  a  $r = 0.09$  y escriba la expresión  $4115.23 * up6 * x^2$ . Evalúe todas las secciones.



## C. Simulación del tanque de membrana

1. En Model Wizard seleccione 3D y elija *Fluid Flow/Single Phase Flow/Laminar Flow*. Presione el botón *Add*. Elija ahora *Fluid Flow/Porous Media and SUBsurfaces/Brinkman Equations*. Presione el botón *Add*. Seleccione por duplicado *Chemical Species Transport/Transport of Diluted Species*. Presione el botón *Add* seguido por *Study* y seleccione *Stationary*; por último presione el botón *Done*.

2. En *Parameters* escriba:

$$Re = Pe/1000, \quad Rec = Re/2, \quad Ef = 0.4, \quad Pe = 1, \quad Biez = 0.1, \quad Bizo = 7, \quad ce = 0.17, \\ co = 0.05 * ce, \quad Ebs = 0.7, \quad Es = 1 - Ef, \quad Eg = 0.1, \quad El = 1 - Es - Eg$$

3. En *Definitions/Variables* defina las siguientes variables:

- $H = (1/300)^2 / (8 * pi) * (-\log(1 - Ef) - 3/2 + 2 * (1 - Ef) - (1 - Ef)^2 / 2)$
- $DA = 1 / (2 - Ebs)$
- $Def = (2 * DA - El * (DA - 1)) / (2 + El * (DA - 1)) + (El + Es) * 0.07 * Pe^{1.7}$

4. En *Geometry* seleccione *Block* y dibuje la siguiente geometría:

- Width: 0.7
- Depth: 0.3
- Height: 1

- x: 0
  - y: 0.1
  - z: 0.2
5. En *Geometry* seleccione *Transforms/Array*, escriba lo siguiente:
- x size: 1
  - y size: 3
  - z size: 1
  - x: 0
  - y: 0.5
  - z: 0
6. En *Geometry* seleccione *Block* y dibuje la siguiente geometría:
- Width: 1.5
  - Depth: 1.7
  - Height: 1.2
  - x: -0.4
  - y: -0.16
  - z: 0
7. En *Geometry* seleccione *Work Plane* y en el plano xy dibuje un plano en la coordenada  $z=1.2$ .
8. En *Work Plane 1/Plane Geometry* seleccione *Ellipse* y escriba lo siguiente:
- a-semiaxis: 0.15
  - b-semiaxis: 0.08
  - Sector angle: 360
  - xw: 0.35
  - yw: -0.05
  - Rotation: 0
- Seleccione *Build All Objects*
9. En *Laminar Flow* seleccione el dominio fuera de los casetes.
10. En *Laminar Flow/Fluid Properties 1* defina lo siguiente:  $\rho = 1$ ,  $\mu = 1/Re$ .
11. En *Laminar Flow* seleccione *Inlet*, seleccione la elipse y defina  $U_0 = 1$ .
12. En *Laminar Flow* seleccione *Outlet* y seleccione en *Boundary Selection* las caras de los casetes, a excepción de la superior. En el apartado de *Velocity* seleccione *Velocity Field* y

- defina las siguientes componentes para la velocidad:  $x = u2$ ,  $y = v2$  y  $z = w2$ .
13. En *Laminar Flow* seleccione *Open Boundary*. En *Boundary Selection* seleccione la superficie del tanque y defina  $f_0 = 0$ .
  14. En *Brinkman Equations*, en el apartado de *Domain Selection*, seleccione todos los casetes.
  15. En *Brinkman Equations/Fluid and Matrix Properties 1* defina los siguientes apartados utilizando la opción de *User Defined*:  $\rho = 1$ ,  $\mu = 1$ ,  $\varepsilon_p = 1$ ,  $\kappa = Pe * H$
  16. En *Brinkman Equations* seleccione *Inlet*. En *Boundary Selection* seleccione las caras de los casetes, a excepción de la superior. En el apartado de *Boundary Condition* seleccione *Pressure* y defina  $p_0 = p$ .
  17. En *Brinkman Equations* seleccione *Outlet*. En *Boundary Selection* seleccione la cara superior de todos los casetes. En el apartado de *Boundary Condition* seleccione *Velocity* y defina  $U_0 = 0.2$ .
  18. En *Brinkman Equations* seleccione *Mass Source*, seleccione todos los casetes y defina  $Q_m = 0$ .
  19. En *Transport of Diluted Species* seleccione el dominio externo a los casetes, y en *Transport Mechanisms* active la casilla de *Convection*.
  20. En *Transport of Diluted Species/Transport Properties 1*, en el apartado de *Convection*, seleccione a la velocidad como *User Defined* e introduzca lo siguiente:  $x = u * Pe$ ,  $y = v * Pe$ ,  $z = w * Pe$ . De forma similar, el apartado de *Diffusion*, defina  $D_c = DA$ .
  21. En *Transport of Diluted Species* seleccione *Flux*, seleccione todas las caras de los casetes con excepción de la superior y active la casilla de *Include* en el apartado de *Convection*. En el apartado de *Inward Flux* elija *General Inward Flux*, active la casilla de *Species c* y defina  $J_{0,c} = -tds.nx * (-Def * c2x + u2 * Pe * c2) - tds.ny * (-Def * c2y + v2 * Pe * c2) - tds.nz * (-Def * c2z + w2 * Pe * c2)$ .
  22. En *Transport of Diluted Species* seleccione *Inflow*, seleccione la elipse en el apartado de *Boundary Selection* y defina  $c_{0,c} = ce$ .
  23. En *Transport of Diluted Species 2* seleccione todos los casetes, y en *Transport Mechanisms* active la casilla de *Convection*.
  24. En *Transport of Diluted Species 2/Transport Properties 1*, en el apartado de *Convection*, seleccione a la velocidad como *User Defined* e introduzca lo siguiente:  $x = u2 * Pec$ ,  $y = v2 * Pe$ ,  $z = w2 * Pe$ . De forma similar, el apartado de *Diffusion*, defina  $D_c = Def$ .

25. En *Transport of Diluted Species 2* seleccione *Flux*, seleccione todas las caras de los casetes con excepción de la superior y active la casilla de *Include* en el apartado de *Convection*. En el apartado de *Inward Flux* elija *External Convection*, active la casilla de *Species c2* y defina  $k_{c,c2} = Biez$  y  $c_{b,c2} = c$ .
26. En *Transport of Diluted Species 2* seleccione nuevamente *Flux*, seleccione todas las caras superiores de los casetes y active la casilla de *Include* en el apartado de *Convection*. En el apartado de *Inward Flux* elija *External Convection*, active la casilla de *Species c2* y defina  $k_{c,c2} = Bizo$  y  $c_{b,c2} = co$ .
27. En *Mesh 1* seleccione *Free Tetrahedral*, y en éste último seleccione *Size*. En la sección de *Element size*, en la sección de *Calibrated for*, seleccione *Fluid dynamics* y coloque una malla computación de grosor *Normal*. Haga click en *Build all*.
28. En *Study 1/Step 1:Stationary*, en el apartado de *Physics and Variables Selection*, active sólo las casillas *Laminar Flow* y *Brinkman Equations*. Presione el botón *Compute*.
29. En la raíz del documento (*root*) seleccione *Add Study* y a continuación seleccione *General Studies/Time Dependent*. Presiones el botón *Add Study*.
30. En *Study 2/Step 1:Time Dependent*, en la sección de *Time* coloque el siguiente intervalo de valores en modalidad logarítmica:
  - Start:  $1e - 4$
  - Stop: 100
  - Steps per decade: 100Presione el botón *Replace*.
31. En *Study 2/Step 1:Time Dependent*, en la sección de *Physics and Variables Selection*, active sólo las casillas *Transport of Diluted Species* y *Transport of Diluted Species 2*. Mientras que en la sección de *Values of Dependent Variables* seleccione la siguiente configuración en la subsección de *Values of variables not solved for*:
  - Settings: User controlled
  - Method: Solution
  - Study: Study 1: Stationary
  - Selection: AuthomaticPresione el botón *Compute*.