



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

“MODELADO MATEMÁTICO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA CONJUGADA EN  
BIORREACTORES DE LECHO EMPACADO”

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
M. en C. WENCESLAO CUAUHTÉMOC BONILLA BLANCAS

TUTOR (ES) PRINCIPAL(ES)  
DR. FEDERICO MÉNDEZ LAVIELLE, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNAM

COMITÉ TUTOR  
DR. FRANCISCO SOLORIO ORDAZ, FACULTAD DE INGENIERÍA, UNAM  
DR. OSCAR ELADIO BAUTISTA GODÍNEZ, SEPI, ESIME, IPN

CIUDAD DE MÉXICO, MARZO, 2021



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: DR. FRANCISCO JAVIER SOLORIO ORDAZ

Secretario: DR. ROGELIO GONZÁLEZ OROPEZA

1 er. Vocal: DR. FEDERICO MÉNDEZ LAVIELLE

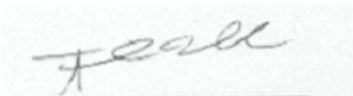
2 do. Vocal: DR. OSCAR ELADIO BAUTISTA GODÍNEZ

3 er. Vocal: DR. JORGE L. NAUDE DE LA LLAVE

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: CIUDAD UNIVERSITARIA, CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO.

**TUTOR DE TESIS:**

DR. FEDERICO MÉNDEZ LAVIELLE



-----  
**FIRMA**

(Segunda hoja)

## ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	10
Capítulo 1 .....	11
1. Introducción .....	11
1.1 Perspectiva energética .....	11
1.2. Biocombustibles .....	14
1.3. Biogás .....	15
1.4. Tecnologías biológicas disponibles para el tratamiento de contaminantes del biogás..	21
1.5 Proceso de formación de las biopelículas .....	26
1.6. Descripción general del proceso de biofiltración en un lecho empacado. ....	28
Capítulo 2 .....	30
2. Modelado matemático del proceso de biofiltración .....	30
2.1. Escalas de tiempo .....	31
2.2. Hidrodinámica y transporte de especies .....	32
2.3. Difusión y cinética de reacción .....	33
2.4. Cinética de reacción.....	33
2.5. Modelado matemático conjugado.....	36
2.6. Antecedentes de modelado matemático de biopelículas .....	36
2.7. Objetivo general .....	39
2.8. Objetivos particulares.....	39
Capítulo 3 .....	40
3. Modelo Físico .....	40
3.1. Consideraciones generales para la construcción de modelo matemático .....	40
3.2. Modelo en la zona del fluido .....	42
3.2.1 Análisis de orden de magnitud .....	42
3.3. Balance de especies en la interfase reactiva .....	45
3.4. Balance de especies en la biopelícula .....	46
3.5. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la zona del fluido .....	47
3.6. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la interfase reactiva.....	51
3.6. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la zona de la biopelícula. ....	54
3.7. Ecuaciones adimensionales del modelo matemático con condiciones de frontera .....	56

Capítulo 4. ....	57
4. Solución numérica del modelo matemático .....	57
4.1. Solución numérica del modelo matemático .....	57
4.1.1. Para la zona del fluido.....	57
4.1.2. Para la zona de la biopelícula .....	59
4.1.3. Condiciones de frontera programadas .....	60
Capítulo 5. ....	67
5. Resultados de la solución del modelo matemático .....	67
5. Resultados .....	67
5.1. Variación paramétrica de $Da_s$ .....	67
5.2 Variación paramétrica de $\alpha_c$ .....	72
5.3. Cálculo del número de Sherwood .....	75
Capítulo 6 .....	77
6. Conclusiones .....	77
BIBLIOGRAFÍA.....	79

## Índice de Figuras

Fig. 1. Ciclos históricos de producción de energía. ....	12
Fig. 2. Consumo energético nacional total de fuentes de energía convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020). Peta es un prefijo del Sistema Internacional que indica un factor de 10 <sup>15</sup> . ....	13
Fig. 3. Consumo energético nacional total de fuentes de energía renovables convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020). ....	13
Fig. 4. Consumo energético nacional total de fuentes de energía renovables no convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020). ....	14
Fig. 5. Esquema de biofiltro. ....	22
Fig. 6. Esquema de biofiltro de lecho escurrido. ....	23
Fig. 7. Esquema de un biolavador. ....	25
Fig. 8. Rangos de tratamiento para distintos dispositivos [24]. ....	26
Fig. 9. Relaciones de formación/actividad en la biopelícula. ....	27
Fig. 10. Proceso de biofiltración de lecho empacado. ....	28
Fig. 11. Escalas de tiempo para los procesos durante biofiltración. ....	31
Fig. 12. Proceso de biofiltración de lecho empacado. ....	40
Fig. 13. Proceso de biofiltración de lecho empacado. ....	41
Fig. 14. Ampliación de la zona próxima a la biopelícula de un lecho empacado. La variable " $\eta$ " se mide desde la superficie de la biopelícula. ....	48
Fig. 15. Programación de las ecuaciones generales de la zona de fluido en Comsol Multiphysics. ....	58
Fig. 16. Programación de las ecuaciones generales de la zona de la biopelícula en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. ....	59
Fig. 17. Programación de las condiciones de frontera de la zona del fluido en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 3 es el punto de entrada del fluido ( $\chi = 0$ ), 7 la frontera de salida ( $\chi = 1$ ), 5 es la zona media del canal ( $\eta = \infty$ ). ....	61

Fig. 18. Programación de la condición de frontera de la zona del fluido en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 4 es la zona donde convergen el fluido y la biopelícula ( $z = 0$ ) .....	62
Fig. 19. Programación de las condiciones de frontera de la zona de la biopelícula en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 1 es el punto de contacto del inicio de la corriente con la biopelícula ( $\chi = 0$ ), 6 la frontera de salida ( $\chi = 1$ ), 2 es la zona del soporte inerte ( $z = 1$ ) .....	64
Fig. 20. Solución numérica general para el modelo matemático usando Comsol Multiphysics. ....	65
Fig. 21. Programación de estudio de barrido paramétrico en Comsol.....	66
Fig. 22. Representación gráfica de la solución numérica del modelo matemático, a) $Da_s=15$ , b) $Da_s=30$ , c) $Da_s=50$ , d) $Da_s=100$ , e) $Da_s=200$ .....	69
Fig. 23. Variación de la concentración en los valores $\chi = 0.25$ y $\chi = 0.75$ para, a) $Da_s=15$ , b) $Da_s=30$ , c) $Da_s=50$ , d) $Da_s=100$ , e) $Da_s=200$ .....	71
Fig. 24. Representación gráfica de la solución numérica del modelo matemático para la variación del parámetro $\alpha_c$ , a) $\alpha_c = 1 \times 10^{-5}$ , b) $\alpha_c = 1 \times 10^{-4}$ , c) $\alpha_c = 1 \times 10^{-3}$ , d) $\alpha_c = 1 \times 10^{-2}$ , e) $\alpha_c = 1 \times 10^{-1}$ .....	73
Fig. 25. Variación de la concentración en los valores $\chi = 0.25$ y $\chi = 0.75$ para, a) $\alpha_c = 1E^{-5}$ , b) $\alpha_c = 1E^{-4}$ , c) $\alpha_c = 1E^{-3}$ , d) $\alpha_c = 1E^{-2}$ , e) $\alpha_c = 1E^{-1}$ , f) $\alpha_c = 1$ .....	75
Fig. 26. Distribución del número de Sherwood local o transferencia de masa adimensional del contaminante, Sh, en función de la coordenada longitudinal adimensional, a) para diferentes valores del número de Damköhler, b) para diferentes valores del parámetro conjugado.....	76

## Índice de Tablas

Tabla 1. Propiedades del biogás[2]. .....	16
Tabla 2. Impurezas del biogás y sus consecuencias.....	16
Tabla 3. Clasificación de los biorreactores para el tratamiento de corrientes gaseosas. ....	22
Tabla 4. Principales consideraciones de los modelos matemáticos de biorreactores. ....	37
Tabla 5. Condiciones de frontera programadas en Comsol para la Zona del fluido .....	61
Tabla 6. Valores de referencia de los parámetros para resolver las ecuaciones del modelo matemático.....	63
Tabla 7. Condiciones de frontera programadas en Comsol para la Zona de la biopelícula.....	65



## Nomenclatura

$\Delta C_i$ , cambio de concentración característico

$\Delta C_B$ , cambio de concentración característico de la biopelícula

$\Delta C_f$ , cambio de concentración característico del fluido

$D$ , coeficiente de difusión

$D_B$ , coeficiente de difusión en la biopelícula

$u$ , componente de la velocidad hidrodinámica en la dirección axial  $x$

$v$ , componente de la velocidad hidrodinámica en la dirección transversal  $y$

$C_i$ , concentración del compuesto contaminante.

$C_{i,\infty}$ , concentración máxima en el seno del fluido

$k_s$ , Constante de saturación

$Da_B$ , número de Damköhler de la biopelícula

$Da_s$ , número de Damköhler de superficie

$Pe_D$ , número de Péclet difusivo

$Re_h$ , número de Reynolds basado en el espesor

$Re_L$ , número de Reynolds basado en la longitud

$Sc$ , número de Schmidt

ADN, ácido desoxirribonucleico

ARN, ácido ribonucleico

CH<sub>4</sub>, metano

CO<sub>2</sub>, dióxido de carbono

COV, Compuestos Orgánicos Volátiles

$h$ , espesor del canal

H<sub>2</sub>O, agua

H<sub>2</sub>S, sulfuro de hidrogeno

$h_B$ , biopelícula de espesor

$L$ , longitud total del microcanal

$L_D$ , longitud de la capa límite difusiva

$L_H$ , longitud de la capa límite hidrodinámica

$N_2$ , nitrógeno

$NH_3$ , amoníaco

PHA, poli-hidroxi-ácidos

Ppm, Partes Por Millón

Ppm<sub>v</sub>, Partes Por Millón volumétricas

SPE, sustancias poliméricas extracelulares

Letras griegas

$\delta_D$  espesor de la capa límite de concentración

$\delta_B$  espesor de la capa límite de la biopelícula

$\mu$  viscosidad dinámica

$\varepsilon$ , coeficiente de esbeltez basado en el espesor de la biopelícula

$\tilde{\varepsilon}$ , coeficiente de esbeltez basado en el espesor del canal

$\alpha_c$ , es el parámetro conjugado

$\mu_{max}$ , Tasa máxima específica de crecimiento celular

$\nu$ , viscosidad cinemática.

## RESUMEN

El paulatino agotamiento de los yacimientos de petróleo y carbón, así como las consecuencias climáticas del uso de estos, ha ocasionado que la investigación entorno a fuentes de energía limpia y renovable se intensifique. Además de fuentes de energía como la eólica, hidráulica y solar en las últimas décadas se han hecho esfuerzos por encontrar más y mejores formas de utilizar recursos energéticos proporcionados de recursos sustentables como la biomasa o el biogás. Para este último, se conocen diferentes tecnologías para el enriquecimiento del biogás, estas se dividen en dos grupos; las fisicoquímicas: que utilizan las propiedades físicas y/o químicas de los compuestos contaminantes del biogás y las biológicas las cuales involucran el uso de microorganismos para hacer un tratamiento del biogás. En ambos casos las tecnologías de tratamiento mayoritariamente implican pasar la corriente gaseosa a través de un medio selectivo para eliminar los compuestos indeseables.

Los sistemas de tratamiento de biopelículas inmovilizadas han demostrado ser eficientes para el tratamiento de diversos compuestos gaseosos que acompañan al biogás. Sin embargo, la fenomenología que implica este tipo de sistemas es compleja, generalmente para simplificar el modelado matemático de estos sistemas, los fenómenos de transporte que los describen suelen estar desligados. En este trabajo se presenta la formulación de un modelo matemático en el cual se conjugan los procesos de transferencia de momento y transferencia de masa para un biofiltro de lecho escurrido. El modelo matemático fue resuelto utilizando las técnicas de análisis de orden de magnitud, análisis dimensional y numéricamente utilizando el módulo de matemáticas de COMSOL. Una vez programada la solución numérica del modelo se realizó un análisis paramétrico para estudiar la influencia de los parámetros determinados en el proceso de tratamiento.

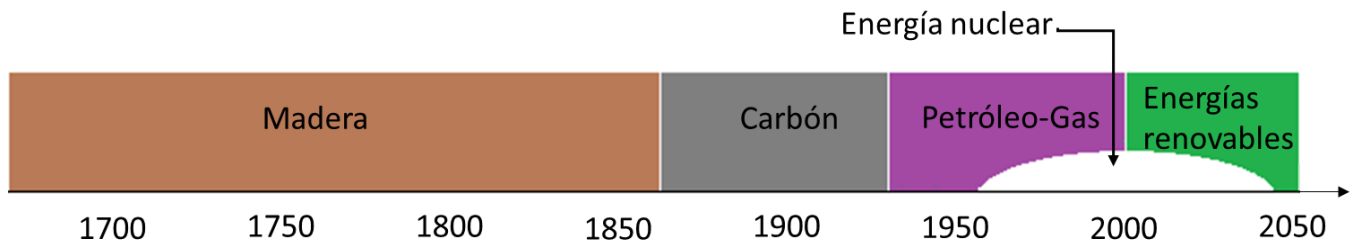
# Capítulo 1

## 1. Introducción

El uso de energía ha estado en la humanidad desde tiempos remotos, actividades básicas como la preparación de alimentos hasta procesos más sofisticados como la síntesis de productos químicos necesitan de energía en cualquiera de sus formas. Con la evolución de la humanidad se ha hecho latente que las fuentes energéticas pueden no ser suficientes para cumplir con todas las necesidades modernas ligadas a las diversas fuentes de energía.

### 1.1 Perspectiva energética

La historia de las fuentes de energía revela que las fuentes de energía naturales han pasado a través de ciclos de producción bien definidos (*ver Fig. 1*). Hasta casi finales del siglo XIX la principal fuente de energía para cocinar y para calentar fue la madera, posteriormente el uso de carbón mineral como fuente de energía tuvo un apogeo por 75 años, a partir de 1950 y hasta la actualidad, los hidrocarburos y gas natural son las principales fuentes de energía; sin embargo son, fuentes de energía finitas y las reservas naturales se agotan cada día, adicionalmente durante su conversión y uso se emiten grandes cantidades de gases de efecto invernadero que tienen principalmente tres efectos nocivos[1]: lluvia ácida, agotamiento de la capa de ozono y el calentamiento global [2], [3]. También hacia 1950 se consideró como alternativa el uso de la energía nuclear, sin embargo, esta última nunca ha sido del todo adoptada debido principalmente a la problemática que la rodea, como el posterior confinamiento de los residuos o el riesgo latente de una fuga o explosión del reactor nuclear, esto deja a las fuentes de energía renovables con una amplia perspectiva para la generación de recursos energéticos.



**Fig. 1. Ciclos históricos de producción de energía.**

El consumo de energía a nivel mundial creció un 39 % de 1990 a 2008 y se prevé que en los próximos 20 años crezca un 50 % [3]. En México, el consumo de recursos a partir de fuentes de energía primaria, fundamentalmente el uso de petróleo, gas natural y carbón mineral, han alcanzado un consumo del 73%, en la Fig. 2., se muestran datos de consumo durante los últimos 16 años en tanto los recursos provenientes de fuentes de energía renovables convencionales como es la geotérmica, eólica e hidráulica durante el mismo periodo de tiempo la producción fue del 3% (ver Fig. 3), en cuanto a las fuentes de energía renovables no convencionales, la secretaria de energía considera dos fuentes que son bagazo de caña de azúcar y la madera como biomasa en la Fig. 4 se presentan datos del consumo a partir de esta fuente de energía, en cuanto al biogás a partir del año 2006 el consumo de este como fuente de recursos energéticos ha aumentado aproximadamente en un 350 %.

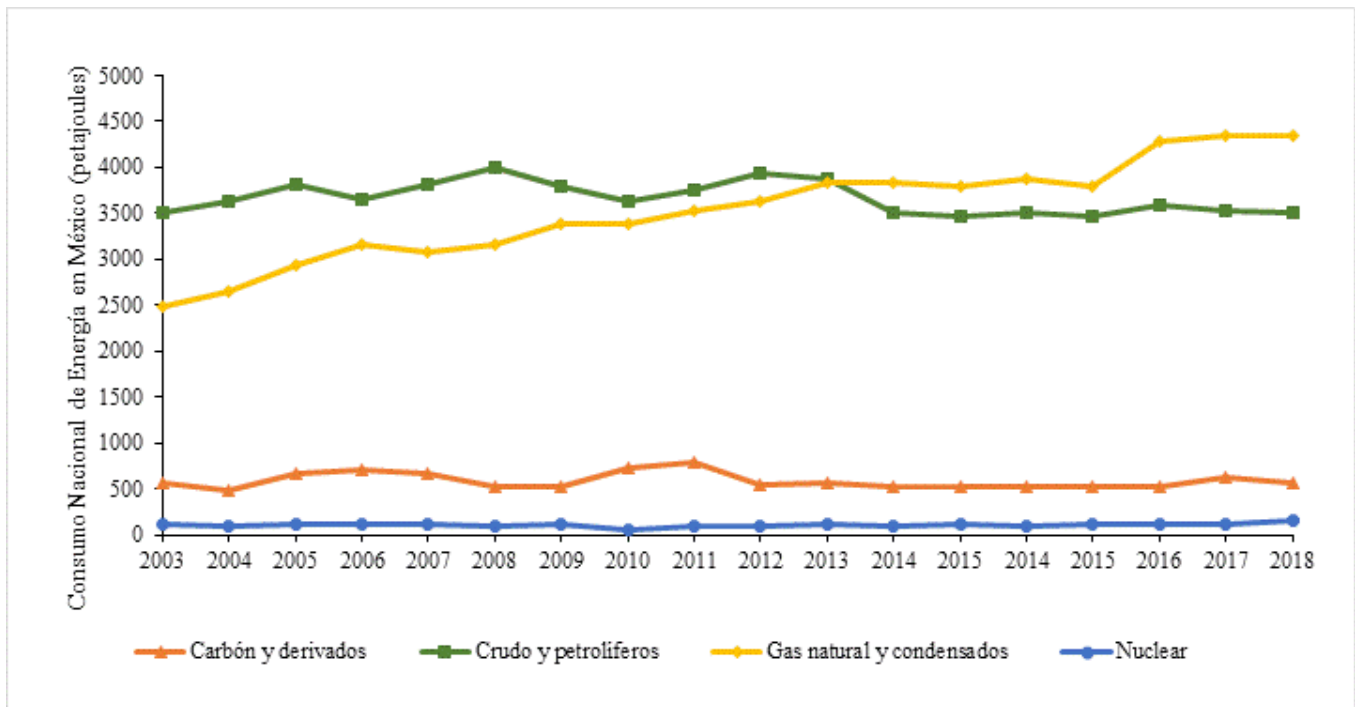


Fig. 2. Consumo energético nacional total de fuentes de energía convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020). Peta es un prefijo del Sistema Internacional que indica un factor de  $10^{15}$ .

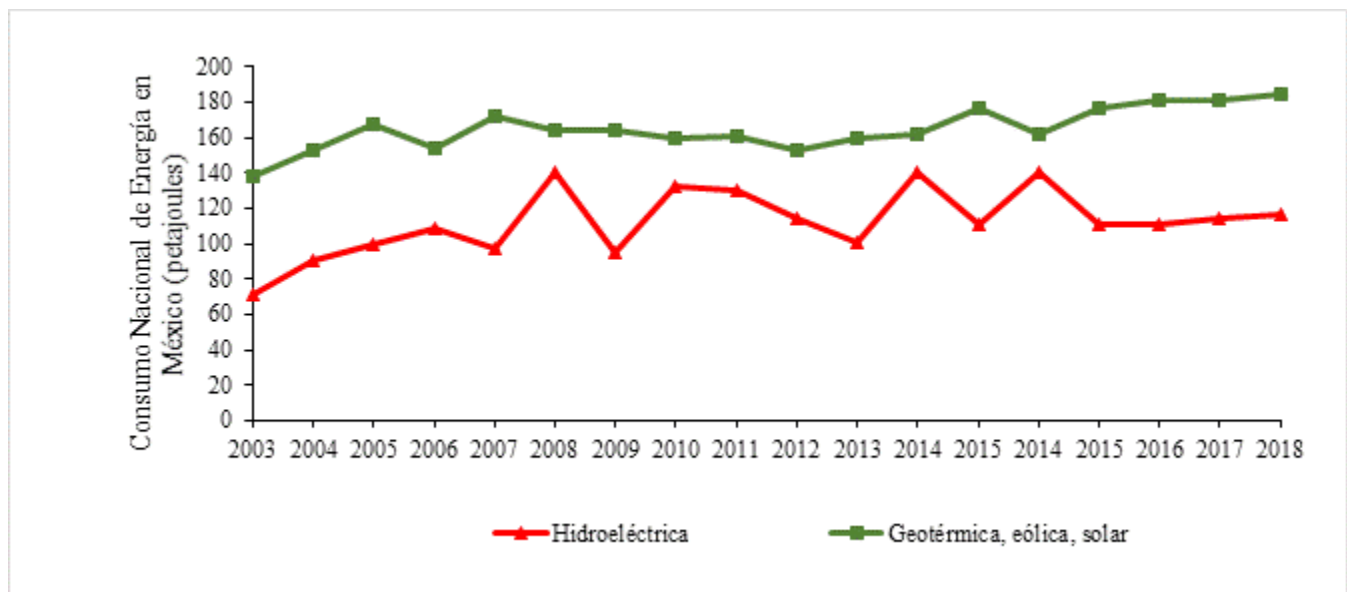


Fig. 3. Consumo energético nacional total de fuentes de energía renovables convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020).

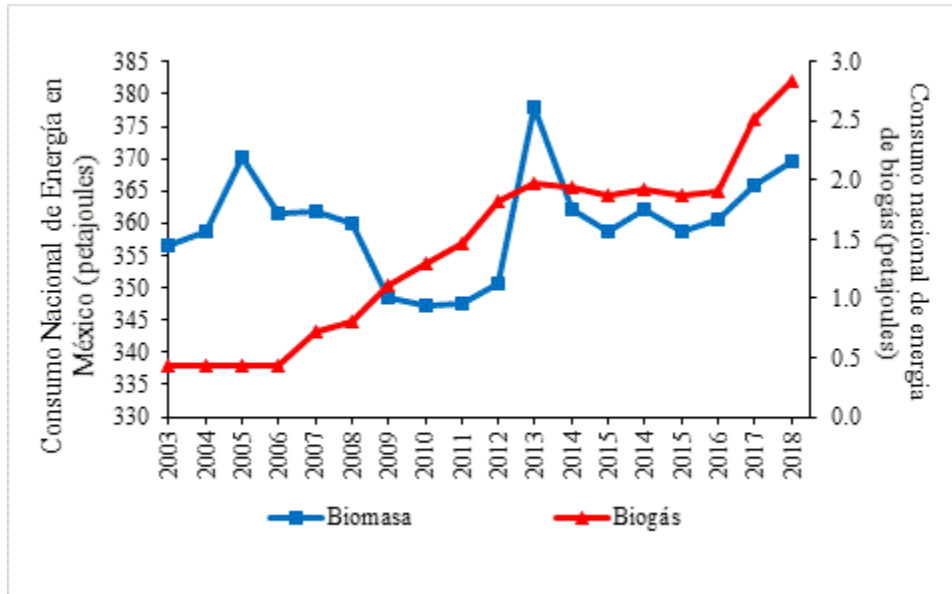


Fig. 4. Consumo energético nacional total de fuentes de energía renovables no convencionales (Sistema de Información Energética, SENER, 2020).

## 1.2. Biocombustibles

El uso de los biocombustibles ha estado íntimamente ligado a la historia de la humanidad. Este es el caso, por ejemplo, del uso de la madera como recurso energético usada mucho tiempo antes que los hidrocarburos. El uso de plantas oleaginosas y azúcares como fuente energética para automóviles se ha considerado desde hace un siglo aproximadamente. Por ejemplo, Nicholas Otto hizo funcionar su primera máquina con etanol, Rudolph Diésel utilizó aceite de cacahuete en sus prototipos para máquinas de combustión interna y el legendario modelo T de Henry Ford tuvo que ser probado con mezclas de etanol-gasolina. Pero a partir de 1940 con un incremento en la disponibilidad de combustibles fósiles baratos, el uso de biocombustibles prácticamente desapareció; sin embargo, a partir de las crisis del petróleo de los años 70 el interés por los biocombustibles como recursos energéticos se renovó con un creciente interés.

En países como Brasil, Estado Unidos de América, China, Kenia, Malawi y la Unión Europea, a partir de la década de los 80 se crearon y fomentaron programas de uso de mezclas de combustibles fósiles/bioetanol producido a partir de distintas fuentes para su uso como combustible en automotores, estos programas tienen como objetivos, disminuir las emisiones de efecto invernadero, reducir el costo en los combustibles, explorar fuentes de energía sustentables entre otros. Además de la problemática sobre el cambio climático, las medidas ambientales han logrado ser unas de los principales incentivos para buscar soluciones en fuentes de energía alternas, con un impacto ecológico bajo y que permitan eludir la dependencia por los combustibles fósiles. Actualmente existe un amplio rango de materias primas disponibles para la producción de biocombustibles como los residuos de la agricultura y ganadería, residuos del procesamiento de alimentos, microalgas, los llamados cultivos energéticos, así como las emisiones de gases en plantas de tratamiento de aguas residuales y en rellenos sanitarios

### **1.3. Biogás**

La palabra biogás es el nombre popularmente usado para la mezcla inflamable de gases que se origina a partir de la degradación de materia orgánica compleja en condiciones anaeróbicas, con presencia limitada de oxígeno, nitrato, sulfato o especies oxidadas de hierro o manganeso [4] en la Tabla 1 se presentan las principales propiedades del biogás. Los productos finales del proceso fermentativo son, principalmente, metano ( $\text{CH}_4$ ) y dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ). La conversión total de la materia orgánica a metano y dióxido de carbono transcurre siguiendo cuatro procesos: hidrólisis, acidificación, acetogénesis y metanogénesis [5]. Este tipo de procesos se encuentran comúnmente en los casos de los tratamientos de efluentes como las plantas de tratamiento de aguas residuales o en los rellenos sanitarios. Su valor comercial ha aumentado por dos razones: (i) porque su liberación a la atmósfera contribuye a los gases de efecto invernadero y (ii) porque su contenido energético es alto, y su aprovechamiento como combustible puede significar una fuente de energía renovable en los próximos años.



**Tabla 1. Propiedades del biogás[2].**

Contenido energético	6.0-6.5 kWm <sup>-3</sup>
Equivalente en combustible	0.6-0.65 L petróleo/m <sup>3</sup> biogás
Temperatura de ignición	650-750 °C (de acuerdo con el contenido de metano mencionado)
Masa molar promedio	16 kg kmol
Densidad	1.2 kg m <sup>-3</sup>
Olor	Huevo podrido

El biogás es generado por la degradación anaerobia de los desperdicios orgánicos y la composición del biogás y la cantidad producida depende del tipo de material en descomposición. La composición del biogás es: metano (CH<sub>4</sub>, 40-75%) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>, 15-60%), agua (H<sub>2</sub>O, 5-10%), sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S, 0.005-2%), siloxanos (0-0.02%), hidrocarburos halogenados (COV, <0.6%), amoníaco (NH<sub>3</sub>, <1%), oxígeno (0-1%), monóxido de carbono (CO, <0.6%) y nitrógeno (N<sub>2</sub>, 0-2%) [6]. En la tabla 2, se presentan los principales contaminantes del biogás y los posibles efectos que pueden tener si no son removidos [7].

**Tabla 2. Impurezas del biogás y sus consecuencias**

Impureza	Posible impacto
Agua	Corrosión en compresores, tanques de almacenamiento y máquinas por la reacción con el H <sub>2</sub> S, NH <sub>3</sub> y CO <sub>2</sub> al formar ácidos
Sulfuro de hidrógeno (H <sub>2</sub> S)	Corrosión en compresores, tanques de almacenamiento y máquinas.  Mal olor perceptible desde 5 ppm <sub>v</sub>

	Toxicidad en concentraciones superiores a los 500 ppm <sub>v</sub> .
Dióxido de carbono (CO <sub>2</sub> )	Disminución del poder calorífico del biogás
Siloxanos	Formación de SiO <sub>2</sub> y microcristales de cuarzo durante la combustión que se depositan en las bujías de ignición, válvulas y cilindros de las máquinas de combustión y ocasionan el deterioro de las mismas
Amoniaco (NH <sub>3</sub> )	Corrosión cuando se disuelve en agua

---

- 1) El uso de biogás está dirigido a dos propósitos generalmente; el primero es la producción de electricidad a través de su uso en máquinas de combustión interna (máquinas de ciclo Otto ó turbinas) ó mediante el uso de calderas de combustión para generar vapor de alta calidad para producir electricidad a través de turbinas de vapor [8]–[10], el segundo propósito es su aprovechamiento como gas natural. En cualquier caso, la calidad del biogás es crucial, esto implica la pureza del biogás y contenido de CH<sub>4</sub>. La limpieza del biogás tiene dos propósitos principales:
  - 1) un proceso de limpieza en el que se remueven los compuestos traza para que sea usado como combustible
  - 2) un proceso de enriquecimiento que implica la remoción de CO<sub>2</sub> para ajustar el poder calorífico [6].

En general dependiendo del tipo de uso que se dé al biogás, marcará la pureza requerida. A continuación, se discuten las principales tecnologías utilizadas para remover los distintos contaminantes presentes en una corriente de biogás.

#### Amoniaco (NH<sub>3</sub>)

Un contaminante común en el biogás es el NH<sub>3</sub>, se origina a partir de la digestión anaeróbica de los anillos nitrogenados de moléculas orgánicas. Es corrosivo y representa un riesgo para la salud humana; sin embargo, su presencia durante la combustión incrementa la emisión de

óxidos de nitrógeno y aún cuando no es considerado tan perjudicial como el  $H_2S$ , al diluirse en agua puede formar ácidos. A escala industrial se elimina por procesos de lavado con ácido nítrico o ácido sulfúrico esto implica que se deben usar equipos de acero inoxidable que incrementan los costos de operación [11] a pequeña escala, como es el caso del biogás. También se puede remover usando sistemas de adsorción como carbón activado o usando sistemas de absorción con agua. La biofiltración se ha convertido en una opción económica y efectiva para eliminar este compuesto. El tratamiento consiste en pasar un flujo de gas a través de un lecho empacado donde es absorbido en una biopelícula y se efectúa la biodegradación[12], [13].

### Ácido sulfhídrico ( $H_2S$ )

El contaminante más común del biogás, independientemente de la fuente es el  $H_2S$  y otros contaminantes azufrados como los mercaptanos que provienen de la fermentación anaerobia de moléculas orgánicas azufradas como las proteínas. Dependiendo del material fermentado la cantidad de  $H_2S$  puede variar de 0.0001 % al 1 %, además del mal olor asociado a este compuesto también es corrosivo y puede ser un riesgo para la salud, reacciona con enzimas en el torrente sanguíneo e inhibe la respiración celular ocasionando una parálisis pulmonar, desmayos y la muerte. Una exposición continua a concentraciones bajas (15- 50 ppm) ocasiona irritación en las vías respiratorias, puede causar dolores de cabeza, desmayos, mareo y náuseas. Exposiciones continuas a concentraciones altas (100-200 ppm) puede resultar en un paro respiratorio que conduce a coma y pérdida del conocimiento. Una exposición continua a concentraciones mayores de 700 ppm por más de 30 min puede ser mortal[14]. Las recomendaciones de distintas normas internacionales indican que, si el biogás contiene más de ppm, no se debe usar como combustible, y por esto se hace necesario buscar métodos para removerlo de la corriente.

Para eliminar este compuesto del biogás existen dos alternativas: (a) procesos fisicoquímicos y (b) procesos biológicos, dentro de la primera categoría se encuentran técnicas como la absorción en soluciones acuosas y la adsorción en materiales adsorbentes, además existen varios títulos de patente basados en tecnologías fisicoquímicas como los métodos LO-CAT® y

LO-CAT II<sup>®</sup> que utilizan soluciones queladas de Fe para reducir al azufre son ampliamente usados para tratar corrientes gaseosas contaminados con H<sub>2</sub>S.

En la segunda categoría encontramos procesos de tratamiento que involucran microorganismos bacteriano como los *Thiobacillus* y *Acidothiobacillus* que usan al H<sub>2</sub>S[15]–[17]. Existen tecnologías patentadas como THIOPAQ<sup>®</sup>[8] que aprovechan el metabolismo de microorganismos sulfuro oxidantes para degradar el H<sub>2</sub>S a especies más estables y menos nocivas como el S<sup>0</sup> y SO<sub>4</sub><sup>-2</sup>.

### Siloxanos (Si-O)

El término siloxano se refiere a los compuestos orgánicos que contienen enlaces Si-O. Este tipo de compuestos son usados en la industria por sus interesantes propiedades, incluyendo: baja flamabilidad, baja tensión superficial, estabilidad térmica, hidrofobicidad, alta compresibilidad, baja toxicidad y generalmente carecen de alergenicidad. Una gran cantidad de estos compuestos se encuentran en shampoos, latas presurizadas, detergentes, cosméticos, fármacos, textiles y recubrimientos de papel [8]. Estos no se degradan durante la digestión anaerobia de lodos y en rellenos sanitarios, sino que se volatilizan y son transferidos al biogás. El principal problema con los siloxanos consiste en la formación de cristales de cuarzo que se depositan en las cámaras de combustión contribuyendo al desgaste y sobre calentamiento de las máquinas.

Hasta ahora se han usado con éxito técnicas para remover los siloxanos, como son:

- Adsorción
- Absorción reactiva con líquidos
- Condensación criogénica

### Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>)

La eliminación de CO<sub>2</sub> de la corriente de biogás implica un aumento en la capacidad calorífica de este y su eventual potencial uso como combustible, para separarlo existen tecnologías fisicoquímicas como la adsorción en carbono activado, sílica gel, alúmina, lavado con agua, condensación y tratamiento con tecnología de membranas[18]. Además se conocen métodos

que utilizan el metabolismo de los microorganismos como la asimilación del CO<sub>2</sub> por algas en las cuales se aprovecha para obtener biocombustibles, alimento para animales, biofarmacos, entre otros[19].

### Agua (H<sub>2</sub>O)

El biogás usualmente está saturado con agua, la cantidad de agua depende de la temperatura, por ejemplo, a 35°C el contenido de agua es aproximadamente 5%. De acuerdo con los estándares, el contenido de agua para el gas natural debe ser de 100 mg·m<sup>-3</sup> y como combustible para vehículos se requiere al menos un punto de rocío de 10 °C por debajo del 99% de la temperatura de diseño de invierno para el área geográfica local a la presión atmosférica. Los métodos para remover el agua de una corriente de biogás se agrupan en dos tipos (a) físicos y (b) químicos. Dentro del primer tipo podemos encontrar:

- Desnebulizador, que consiste en separar partículas de líquido con una malla con una apertura de 0.5-2 nm.
- Separadores de ciclón; consisten en separar gotas de agua usando fuerzas centrífugas
- Trampas de humedad; consiste en separar el agua mediante la condensación por expansión, esto origina una disminución en la temperatura que a su vez condensa el agua.
- Válvulas de paso en la tubería del biogás; el agua se condensa y es posible separarla por este método.

Algunos métodos químicos para eliminar el agua son:

- Secado por adsorción; consiste en atrapar el agua al pasar la corriente de biogás por una columna rellena de material adsorbente como sílica gel, carbón activado, óxido de aluminio entre otros. El material de empaque puede ser regenerado.
- Absorción con trietilenglicol; este método consiste en usar trietilenglicol para remover el agua en una corriente de biogás, posteriormente se puede regenerar el trietilenglicol en unidades separadas usando temperaturas de 200°C.

#### **1.4. Tecnologías biológicas disponibles para el tratamiento de contaminantes del biogás**

Desde finales del siglo pasado los tratamientos biológicos han encontrado una amplia aplicación en tratamiento de aguas residuales y se han propuesto una amplia gama de procesos para el tratamiento de corrientes gaseosas. Una de estas tecnologías aplicadas es la biofiltración, la cual consiste en pasar una corriente gaseosa a través de un lecho poroso que contiene a los microorganismos en forma de biopelícula para degradar a los contaminantes [20]. El término biopelícula se refiere a una superficie en la que coexisten comunidades de microorganismos formando flóculos y agregados celulares. Los microorganismos que forman biopelículas están embebidos en sustancias poliméricas extracelulares (SPE) que ellos mismos producen que les ayudan a coexistir de manera coordinada y de esta manera beneficiarse de los nichos ecológicos formados por la biopelícula [21]. Por otra parte, los biofiltros no son estrictamente unidades de filtración, son sistemas que usan una combinación de procesos básicos como: absorción, adsorción, degradación y desorción de la fase gaseosa contaminante. Como la mayoría de los tratamientos biológicos, la biofiltración depende de una serie de reacciones metabólicas de los microorganismos para la degradación de los compuestos contaminantes que bajo condiciones óptimas se degradan a compuestos no contaminantes y biomasa.

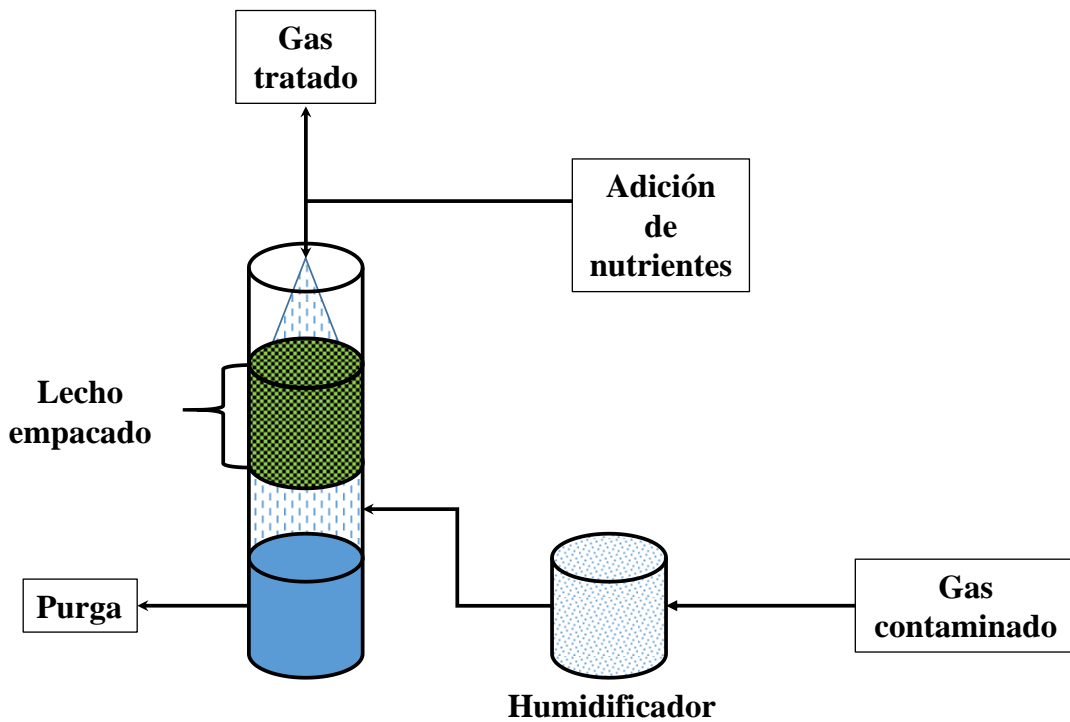
Aunque existen diferentes configuraciones de reactores biológicos, debido a sus bajos costos y facilidad de operación, principalmente se emplean biofiltros, biofiltros de lecho escurrido y biolavadores en el tratamiento de corrientes gaseosas [22]. Aún cuando los mecanismos básicos de remoción de contaminantes son similares en todos los tipos de reactores; la diferencia radica en la fase en la que se encuentran los microorganismos que pueden estar suspendidos en un fase acuosa o adheridos a un soporte formando una biopelícula, otra diferencia en los diferentes reactores es el estado de la fase líquida, la cual puede ser de flujo continuo o estacionaria (*ver Tabla 3*) [23].

**Tabla 3. Clasificación de los biorreactores para el tratamiento de corrientes gaseosas.**

Tipo de reactor	Estado del microorganismo	Estado de la fase acuosa
Biofiltro	Fijo	Estacionaria
Biofiltro de lecho escurrido	Fijo	Flujo continuo
Biolavador	Suspendido	Flujo continuo

### Biofiltro

En este tipo de dispositivos, el flujo contaminado pasa por un reactor de lecho empacado de material húmedo en el cual existe una biopelícula (ver Fig. 5) La diferencia con respecto a los biofiltros de lecho escurrido consiste en la ausencia de una fase líquida recirculando continuamente por el lecho empacado del reactor.



**Fig. 5. Esquema de biofiltro.**

Sin embargo, existe una película de líquido que se encuentra estancada en la biopelícula, esta película de líquido tiene varias funciones las principales son mantener húmedo el lecho

empacado, proporcionar medio nutritivo para los microorganismos y/o medio neutralizante para mantener las condiciones apropiadas para sostener a la biopelícula [24].

### Biofiltros de lecho escurrido

Los filtros de lecho escurrido (ver Fig. 6) consisten en columnas empacadas con material estructurado que permite el desarrollo de una película microbiana que favorece el aumento de la densidad celular volumétrica. Por lo general, el área específica del empaque (área de contacto por unidad de volumen de columna) es relativamente baja ( $100$  a  $300 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ), si se compara con valores de área superficial de soportes orgánicos de uso común en biofiltros y se prefieren volúmenes vacíos altos (90 a 95 %) para minimizar la caída de presión en la columna y evitar que el crecimiento de los microorganismos obstruya el sistema.

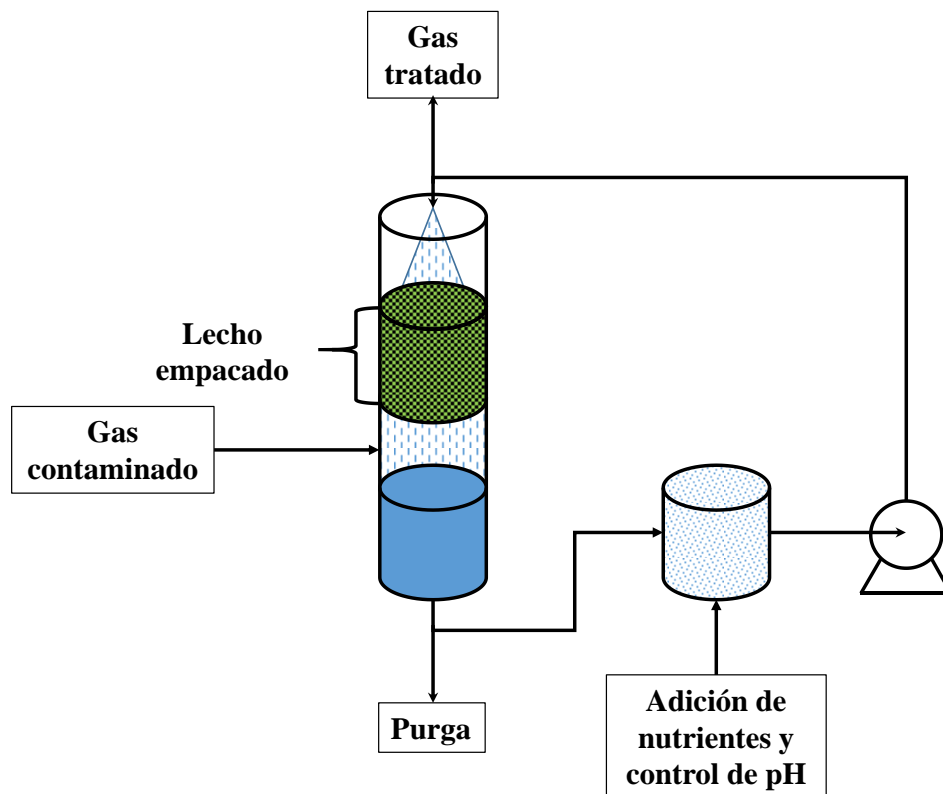


Fig. 6. Esquema de biofiltro de lecho escurrido.



Este tipo de tratamiento es efectivo y de bajo costo para bajas concentraciones de contaminantes en altos flujos de gas. Los contaminantes gaseosos son absorbidos en una fase líquida y transferidos a una biopelícula donde los microorganismos mediante sus reacciones metabólicas degradan al contaminante. Los contaminantes gaseosos pueden ser orgánicos o inorgánicos estos son usados como fuente de carbono, nitrógeno y energía para los microorganismos. Con este tipo de tecnologías se degradan fácilmente compuestos como sulfuro de hidrógeno, amoníaco, además de compuestos orgánicos como alcoholes, aldehídos, cetonas y algunos aromáticos simples. En algunos casos como fenoles, compuestos clorados, hidrocarburos, poliaromáticos y compuestos altamente halogenados presentan una degradación moderada de los compuestos contaminantes.

### Biolavadores

Los biolavadores, Fig. 7, consisten en un compartimiento en donde se lleva a cabo la absorción y un reactor biológico adicional de regeneración. En el absorbedor los contaminantes se transfieren a un medio acuoso hasta condiciones cercanas a la saturación. El líquido se recircula al reactor biológico en donde se lleva a cabo la oxidación por microorganismos en suspensión. Una vez reducida la concentración del contaminante en el líquido, este es reciclado al absorbedor. Las densidades celulares son menores que en los biofiltros de lecho escurrido.

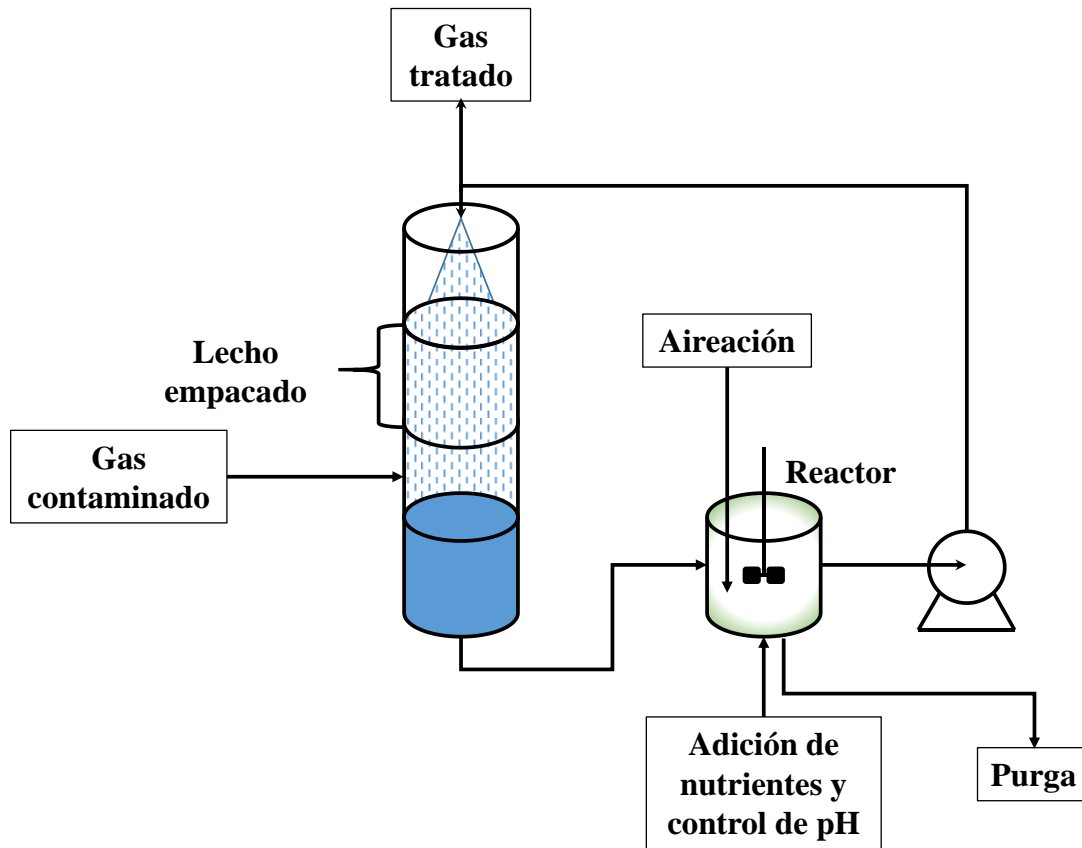


Fig. 7. Esquema de un biolavador.

En general la biofiltración implica gastos de operación bajos además la generación de subproductos es mínima, otro aspecto que es necesario analizar es la capacidad de tratamiento de contaminantes de ambos tipos de tecnologías, en la Fig. 8, se condensa información sobre las capacidades de eliminación de equipos tanto biológicos como fisicoquímicos. Como se muestra en la figura los biofiltros son capaces de tratar concentraciones altas de contaminantes, así como flujos altos de corrientes gaseosas.

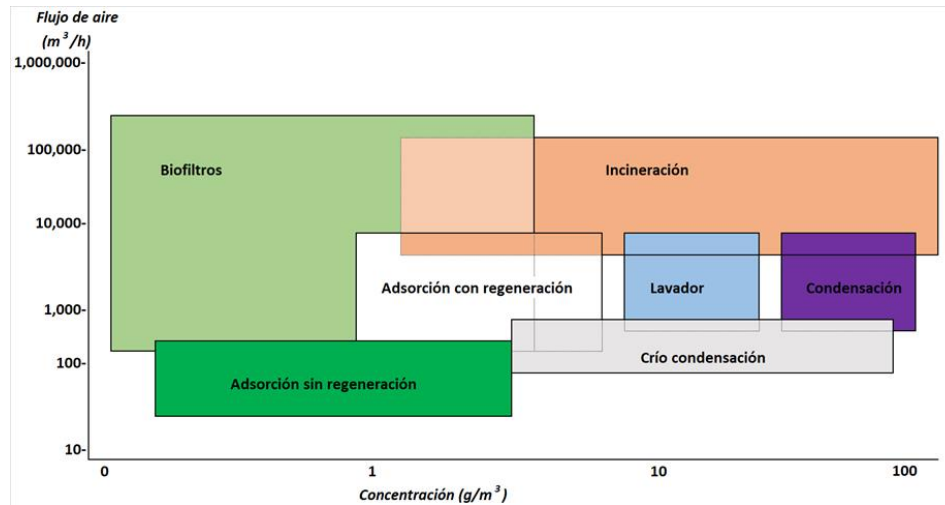


Fig. 8. Rangos de tratamiento para distintos dispositivos [24].

Aún cuando los tratamientos biológicos son una alternativa viable, ecológica, de bajo costo y sustentable, tiene limitaciones de operación como son las concentraciones de tratamiento, capacidad de eliminación y eficiencia en la remoción de contaminantes que hacen deseable trabajar con este tipo de equipos en las mejores condiciones, hidrodinámicas y de crecimiento de biomasa, posibles.

### 1.5 Proceso de formación de las biopelículas

La expansión de la biopelícula en el soporte se debe al crecimiento bacteriano y la producción de polímero extracelular. Los nutrientes necesarios para el crecimiento bacteriano se disuelven en el flujo de líquido. Para llegar a las células pasan primero a través de una capa límite (transferencia de masa externa) y luego a través de la matriz de la biopelícula (transferencia de masa interna). La resistencia de transferencia de masa externa está dada por el espesor de la capa límite de concentración ( $\delta_D$ ), que se correlaciona directamente con la capa límite hidrodinámica ( $\delta_H$ ) que resulta de la configuración de flujo sobre la superficie de la biopelícula. Por tanto, podemos decir que por un lado el flujo de fluido impulsa el crecimiento de biopelículas mediante la regulación de la concentración de sustratos y productos en el líquido-sólido interfaz [25].

El proceso de fijación de las biopelículas al soporte es complejo y puede ser afectado por factores celulares, ambientales y relacionados con la superficie a la que se adhiere. La formación de la biopelícula implica distintos pasos, inicia cuando las bacterias planctónicas (bacterias en busca de nutrientes para su supervivencia) se adhieren a la superficie sólida desde un ambiente líquido. Posteriormente se da una división de las células unidas, junto con la secreción simultánea de SPE adhesivas para generar una capa de biopelícula delgada sobre la superficie sólida. Una mayor proliferación celular y la producción de SPE resultan en el crecimiento y maduración de la biopelícula [26]. Sin embargo, la biopelícula no crece infinitamente, en cierto punto, el colapso de la estructura es inevitable. La biopelícula se rompe y los microorganismos son liberados al medio circundante para convertirse nuevamente en bacterias planctónicas e iniciar nuevamente el proceso (ver Fig. 9) [27].

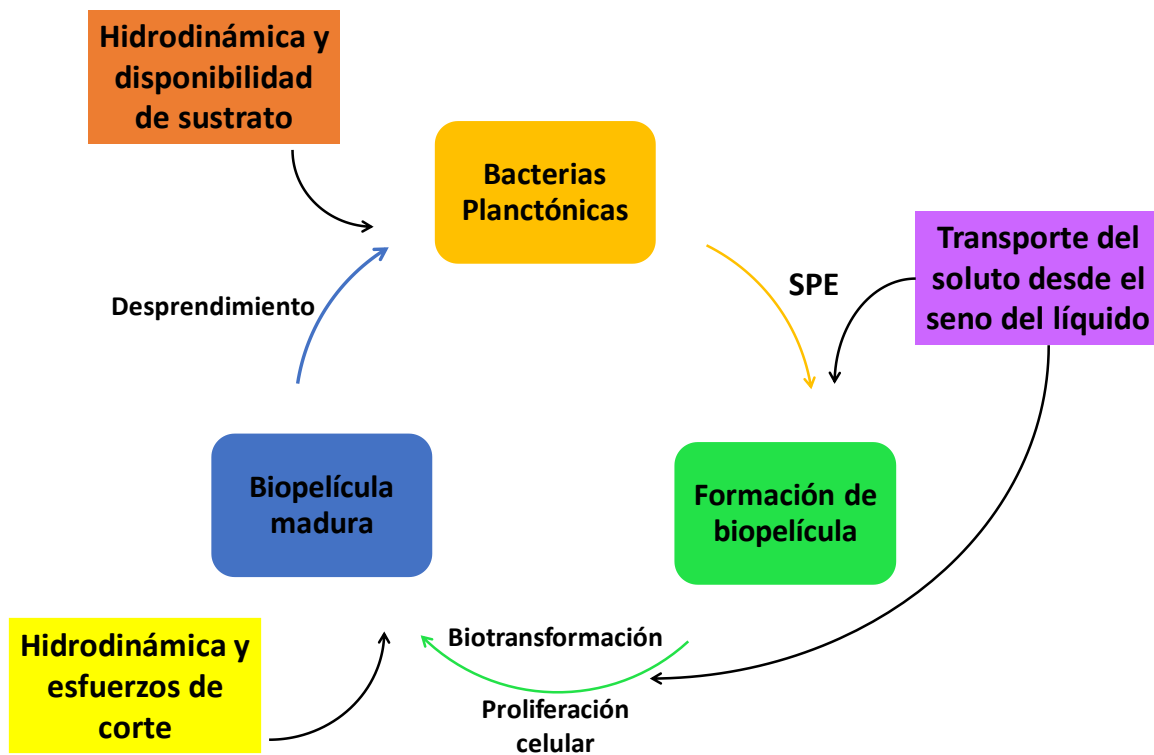


Fig. 9. Relaciones de formación/actividad en la biopelícula.

## 1.6. Descripción general del proceso de biofiltración en un lecho empacado.

El tratamiento inicia mediante la transferencia del contaminante de la fase gas a la fase líquida, este transporte se realiza debido a un gradiente de concentraciones entre las dos fases. Los contaminantes disueltos se transportan en la fase líquida por difusión y convección a través del lecho empacado del biofiltro, en el líquido el contaminante probablemente formará complejos con los compuestos orgánicos en la fase líquida que eventualmente son absorbidos por las SPE generadas por las biopelículas. Finalmente, la biotransformación convierte al contaminante en biomasa, subproductos metabólicos, dióxido de carbono y agua.

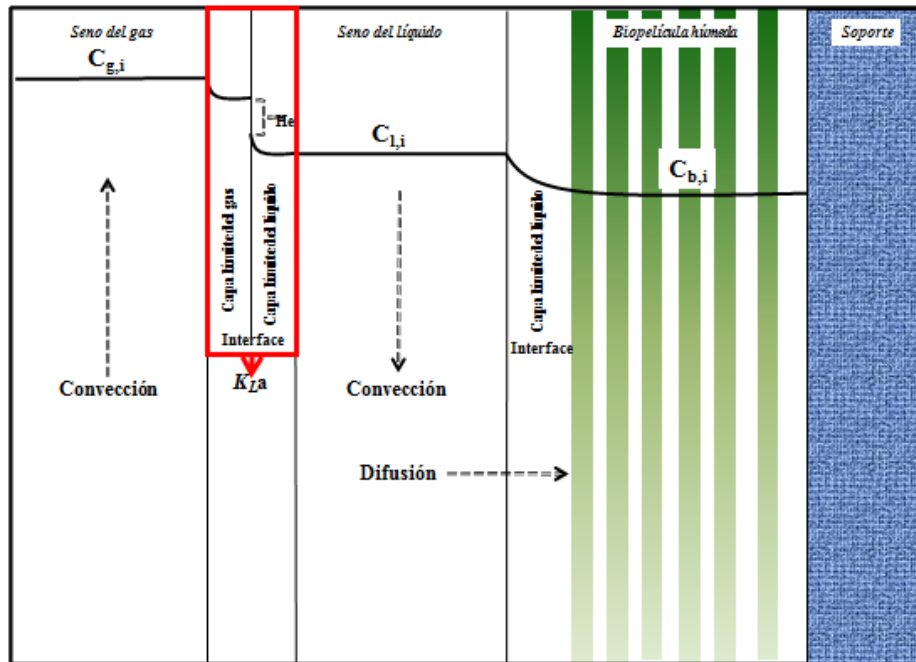


Fig. 10. Proceso de biofiltración de lecho empacado.

Además, bajo condiciones reales de operación la biotransformación es efectuada por complejos ecosistemas de degradadores, competidores y predadores que están más o menos organizados en biopelículas [23]. Y cada paso es susceptible de ser analizado para entender la compleja red de fenómenos que pueden, en un caso extremo, ocasionar la falla general del sistema y que

representan una oportunidad para mejorar el proceso de biofiltración. En cada punto de la secuencia existe una oportunidad para identificar el paso más lento y poder mejorar los límites de la eficiencia del sistema.

# Capítulo 2

## 2. Modelado matemático del proceso de biofiltración

Unificar los conocimientos biológicos, físicos y químicos para el tratamiento de efluentes contaminantes se hace a través de la formulación de modelos matemáticos del proceso de biofiltración que procuran describir y predecir el comportamiento de este tipo de sistemas además también sirve como una herramienta para el dimensionamiento y el diseño [28].

En la construcción de un modelo se consideran los siguientes aspectos de análisis:

- Identificación del sistema.
- Análisis de las características intrínsecas del sistema.
- Determinación de variables de estado, que hacen referencia al comportamiento que el modelo matemático deberá emular.
- Determinación de parámetros.

Las expresiones matemáticas que relacionan las variables de estado y los parámetros del sistema constituyen las ecuaciones de estado, que describen la evolución del sistema en el tiempo. Las ecuaciones de estado se establecen a partir de balances básicos de materia y energía que matemáticamente se representan a través de ecuaciones algebraicas y/o ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales para sistemas homogéneos o heterogéneos respectivamente. Los procesos de biofiltración son altamente no lineales y variables en el tiempo. Esta última característica, se debe al hecho de que los microorganismos están cambiando, aunque lentamente, su fisiología y morfología de forma continua. Por otra parte, el comportamiento no lineal se debe a muchos factores como son la cinética del crecimiento celular, la formación de productos, las limitaciones termodinámicas, entre otros. Un modelo matemático puede ser estructuralmente correcto, pero hay que identificar los valores de los parámetros que hacen que el modelo explique bien el comportamiento real. Este proceso se llama identificación de parámetros o calibración del modelo, y requiere de series temporales de datos y la minimización del error entre los valores simulados y los reales, mediante el ajuste de los parámetros cinéticos, físicos u operacionales del modelo. Para el diseño de un biorreactor

de lecho empacado como su optimización es necesario construir un modelo matemático adecuado que considere los distintos fenómenos de transporte como transporte de la cantidad de movimiento y masa. Se pueden encontrar modelos matemáticos simples, básicamente relaciones empíricas hasta algoritmos computacionales complejos que describen la morfología en 3D de la biopelícula y la mejor elección de estos dependerán del tipo de biopelícula, de los objetivos y habilidades del modelador [29].

### 2.1. Escalas de tiempo

Los procesos en biopelículas ocurren en escalas de tiempo muy diferentes. Mientras que procesos como el crecimiento, muerte y desprendimiento de la biopelícula pueden llevarse a cabo en días, los procesos de transporte de masa e hidrodinámica ocurren en fracciones de segundo como se representa en la Fig. 11, [30], [31].

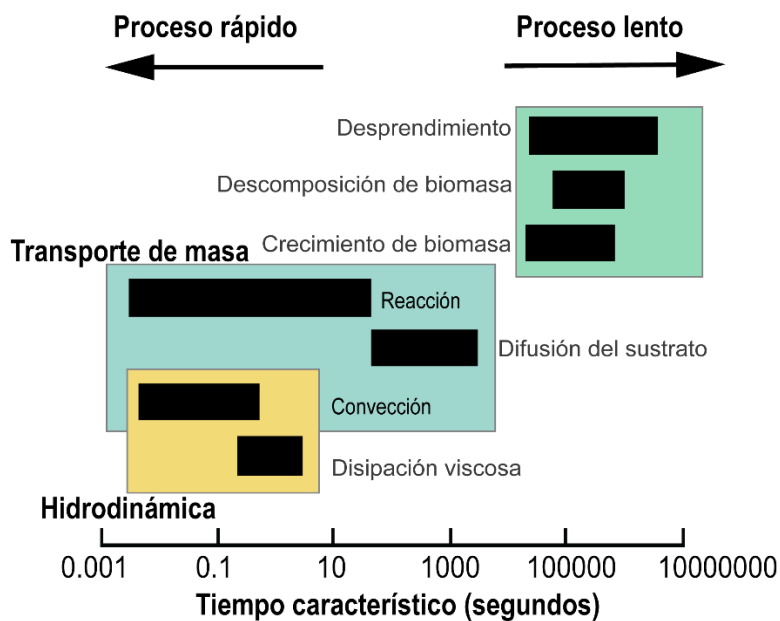


Fig. 11. Escalas de tiempo para los procesos durante biofiltración

La importancia de la dependencia temporal de cada uno de estos procesos radica en la interconexión que existe en cada etapa; esto es, si en un proceso cuyo tiempo de reacción es



pequeño, la dependencia del proceso de eliminación será dictada por el proceso de transferencia entre fases o la difusión que puedan presentar las especies hasta llegar a la biopelícula que es donde ocurre la reacción.

## **2.2. Hidrodinámica y transporte de especies**

El sistema de biofiltración sigue siendo en esencia un sistema de reacción heterogénea en la que existen distintas fases en contacto, estas fases continuas al estar en movimiento afectan el proceso de tratamiento [32]. Si se habla de la parte macroscópica de la biopelícula, las corrientes de los fluidos generan fenómenos como la rugosidad, desprendimiento de células individuales y grupos de células, en un lecho empacado estas células darán origen a más biopelículas [33]. Por otro lado, las especies químicas presentes en las fases continuas, tienen distintos grados de solubilidad como el oxígeno y sulfuro de hidrógeno [34], siendo el segundo casi 50,000 veces menos soluble que el primero, otro problema relacionado con el movimiento de las fases continuas reside en la capacidad de difusión de las especies a través de estas; aun cuando los números nos dicen que no existen diferencias significativas en la misma fase continua, si se analiza el problema del transporte difusivo de una fase continua a otra el problema es importante, por ejemplo el coeficiente de difusión del  $O_2$  en aire es  $0.298 \text{ m}^2/\text{h}$  en tanto que en agua tiene un valor de  $6.799 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{h}$  [35]. Si se simplifica el proceso difusivo a un transporte entre una fase líquida y la biopelícula, el problema prevalece siendo el transporte en la fase continua más rápido que en la biopelícula [36], [37], además de la complejidad de no tener formas fiables de medir concentraciones de especies al interior de las biopelículas sin tener que destruirlas [38], [39]. Es por esto que comúnmente se simplifica a considerar la difusión en la biopelícula como la misma del agua, debido a que está compuesta mayormente de esta última. Otro aspecto importante es el área de transferencia entre las fases; en los reactores de lecho empacado, el problema es complejo debido a la presencia de dos fases fluidas, la biopelícula y el soporte. La selección de este último tiene implicado la cantidad de área superficial para realizar los procesos de transferencia [40], [41] de las diversas especies que están presentes, además en el se adhiere la biopelícula que realiza la transformación.

### **2.3. Difusión y cinética de reacción**

Las reacciones heterogéneas implican varios pasos. La primera es la transferencia de la especie que reacciona en la superficie sobre la que se produce la reacción (superficie de reacción). El segundo paso es la reacción heterogénea en sí, este paso está compuesto a menudo de una serie de subetapas que pueden incluir la difusión de los reactivos a través del material, adsorción en la superficie, reacción química, desorción de productos y difusión de productos fuera del material. La tercera etapa es la transferencia de los productos lejos de la superficie de reacción en la fase de volumen. La tasa global se controla por la velocidad del paso más lento. A continuación, se denomina etapa de determinación de velocidad o etapa de limitación de velocidad. Si el paso que limita la velocidad es uno o tres pasos, implica la introducción o eliminación de reactivos, entonces se dice que la reacción es controlada por difusión, con la velocidad gobernada por las relaciones de transporte de masa establecidas previamente. Por otra parte, si el paso dos, que implica la transformación química, física o biológica, es el paso lento, entonces la velocidad es determinada por la cinética del proceso dado. Como se ha indicado, en este paso puede haber una distinción entre la difusión y las tasas químicas, físicas o bioquímicas. Aquellos casos en que las velocidades de las etapas de difusión y reacción son comparables a veces se denominan reacciones mixtas heterogéneas [42]. Para cuantificar cuál de los dos fenómenos predomina en durante todo el proceso se puede utilizar el número de Damköhler, este parámetro adimensional se utiliza en ingeniería de reactores químicos para determinar si durante el proceso de tratamiento predomina la reacción o el fenómeno de difusión de especies [43].

### **2.4. Cinética de reacción**

La búsqueda de un entendimiento adecuado de la organización y función de los microorganismos en las biopelículas ha permitido el desarrollo de una amplia variedad de modelos matemáticos durante las últimas décadas. La composición y actividad de la biopelícula son dos parámetros importantes para una operación exitosa y control en procesos de tratamiento de aguas residuales y biofiltración del biogás. Datos ampliamente utilizados para la

caracterización de biopelículas son el espesor de la biopelícula, peso seco total y el recuento celular total. Sin embargo, estos parámetros no son suficientes para describir la actividad de la biopelícula [44]. Distintos métodos han sido propuestos para la determinación de parámetros cinéticos en la biopelícula. El más simple y más comúnmente utilizado consiste en determinar los parámetros biocinéticos, a partir de experimentos por lotes en sistemas suspendidos y después aplicar estos valores a sistemas inmovilizados. Sin embargo, el modelado matemático de una biopelícula es más complejo comparado con la biomasa en suspensión [45] debido a que la composición fisiológica y especies que conforman a las biopelículas son diferentes de los sistemas de crecimiento suspendido, lo que hace poco probable que los parámetros cinéticos de los sistemas de en suspensión sean exactos predictores de los sistemas inmovilizados. Otros han utilizado cultivos de biopelículas, pero después de medir los parámetros, la alteración de la estructura de la biopelícula es inevitable, entonces esta forma de determinar los parámetros biocinéticos se debe considerar como un pseudo sistema suspendido con alguna incorporación de la cinética de transporte de sustrato.

El proceso de degradación de los compuestos no deseados en la biopelícula requerirá la alimentación de datos de la velocidad cinética. Incluso en el caso de reacciones químicas simples, estos datos deben obtenerse mediante experimentos de laboratorio. La gran complejidad de las reacciones biológicas, que ocurren en una célula viva, parece implicar una tarea casi imposible para obtener datos de velocidad significativos para aplicaciones del modelado matemático biológico.

Sin embargo, es posible una descripción general razonable de los datos de la tasa de crecimiento celular, basada en una relación empírica general, la Ecuación de Monod, se ha encontrado que se adapta bien a muchas observaciones generales del crecimiento celular [46], [47]. Está basada en el resultado neto de muchas reacciones bioquímicas que ocurren simultánea y que interactúan entre sí, por supuesto representa una simplificación excesiva de la situación real. Que, sin embargo, parece funcionar en muchos casos y también puede modificarse fácilmente para permitir la absorción del sustrato por las células e incluir efectos adicionales, como la limitación del sustrato, la limitación múltiple del sustrato e inhibición por productos.

La expresión cinética de Monod, es un homólogo de la ecuación de Michaelis-Menten, Monod llegó a ella empíricamente, es decir, su relación proporcionó un buen ajuste para sus datos experimentales [48]. Monod propuso que la tasa de crecimiento específico es inversamente proporcional a la concentración del sustrato. cómo puede apreciarse en la ecuación:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{C_i}{k_s + C_i}$$

Donde:

- $\mu_{\max}$  Tasa máxima específica de crecimiento celular (h-1)
- $k_s$  Constante de saturación de sustrato
- $C_i$  Concentración de sustrato

Cuando se usa de esta manera, la cinética celular carece por completo de cualquier interpretación mecanicista y constituye lo que se conoce como un modelo *cinético no estructurado*.

En otros casos, puede ser necesario observar con cierto detalle los procesos y reacciones celulares individuales, para obtener una descripción más realista, lo que lleva al uso de *modelos cinéticos estructurados*. En el caso más simple, las células están compuestas de una parte catalítica que comprende proteínas, ARN, ADN y otros compuestos celulares y de una parte de almacenamiento, como ácidos poli-hidroxi-alcánicos (PHA) o cuerpos de inclusión de proteínas recombinantes [49]. Los modelos estructurados tienen en cuenta aspectos básicos de la estructura celular, su función y composición, en general estos modelos contienen variables que miden la calidad de la biomasa, pero pueden parecer complejos, un buen número de modelos estructurados han aparecido en la literatura. Desafortunadamente, la formulación de estos modelos parece ser particularmente susceptible a errores [50]. Por otro lado la concentración celular total solo se considera en modelos no estructurados y, por lo tanto, no implican ninguna caracterización fisiológica de las células [51].

## **2.5. Modelado matemático conjugado**

El estudio conjugado de la transferencia de masa hace énfasis en el hecho de que no existen procesos aislados, como el transporte de momento y transporte de calor [52] o transporte de momento y la transferencia de masa, ya sea convección natural o forzada el efecto que tenga el movimiento de las fases sobre las biopelículas es importante y ambas están ligadas, como se explica en las secciones previas es importante. El diseño de estos estudios ha sido aplicado con éxito en casos de transporte de momento y transferencia de calor [52]–[54] pero en el caso de estudios de transporte de momento y transferencia de masa es prácticamente nula, a pesar de la importancia que debe tener hacer soluciones acopladas.

## **2.6. Antecedentes de modelado matemático de biopelículas**

El crecimiento de una biopelícula es un proceso dinámico complicado, determinado por los procesos físicos del medio circundante, los procesos químicos y biológicos. Los modelos matemáticos de las biopelículas y del proceso de biofiltración, no son usados solamente para verificar la información experimental encontrada sino también para hacer predicciones cuantitativas y cualitativas que pueden servir como guía para el diseño experimental [31]. En las cuatro últimas décadas se ha dado una importante acumulación de conocimiento debido a la evolución de los modelos matemáticos, los cuales han evolucionado de modelos simples a modelos complejos, de modelos en una sola dimensión a elaborados modelos en tres dimensiones que pretenden emular el comportamiento real de las biopelículas. De modelos en estado estáticos a modelos en estado transitorio de modelos en los que solo existe una sola especie de microorganismos a modelos con múltiples especies microbianas de modelos simples de crecimiento a modelos que incluyen crecimiento, la interacción de la biopelícula y el fluido en el que se encuentra inmerso. De modelos que describen un proceso en particular a modelos que describen procesos que ocurren simultáneamente [31].

Desde finales del siglo pasado, aunado al desarrollo de sistemas de cómputo más rápidos y eficaces se han hecho numerosos esfuerzos para lograr un modelamiento matemático adecuado de los procesos de biofiltración. Los primeros esfuerzos de modelamiento matemático

de procesos de biofiltración se identifican en 1970, cada etapa de modelamiento se considera distintos componentes por ejemplo en los modelos de 1D se consideraron elementos de difusión y reacción, que derivó en una mejora por la consideración de la transferencia de masa al seno a la biopelícula; otros elementos importantes considerados en este tipo de modelos es el desprendimiento de biomasa de la biopelícula al seno del líquido y la existencia de múltiples especies biológicas coexistiendo en la biopelícula. A partir de la década de 1990, la simplicidad de la programación de los modelos matemáticos en sistemas computacionales cada vez más eficientes y rápidos ayudo a la programación de modelos en 2D y 3D en la *Tabla 4* se presentan las principales consideraciones realizadas para la construcción de algunos modelos matemáticos uni y multidimensionales, así como una lista de los fenómenos no considerados hasta el momento.

**Tabla 4. Principales consideraciones de los modelos matemáticos de biorreactores.**

Número de dimensiones del modelo	Principales consideraciones [45], [55]	Consideraciones no incorporadas en el modelamiento de biorreactores
1	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelos de difusión–reacción</li> <li>• Transferencia de masa del seno del líquido a la biopelícula</li> <li>• Desprendimiento de biomasa</li> <li>• Múltiples especies biológicas conformando la biopelícula</li> <li>• Geometría plana</li> <li>• Estado estacionario</li> <li>• Densidad de la biopelícula</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Descripción de la biomasa a lo largo del eje perpendicular al sustrato</li> <li>• Hidrodinámica del líquido</li> <li>• Crecimiento de la biopelícula</li> <li>• Problema conjugado de transporte de masa del soluto a través de la biopelícula.</li> </ul>
2	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Influencia de los esfuerzos de corte en la biopelícula por la</li> </ul>	

---

	inclusión de la hidrodinámica de la fase líquida	<ul style="list-style-type: none"><li>• Profundidad de penetración del sustrato en la biopelícula</li></ul>
3	<ul style="list-style-type: none"><li>• Influencia de los esfuerzos de corte en la biopelícula por la inclusión de la hidrodinámica de la fase líquida.</li><li>• Interacción de la biopelícula con la hidrodinámica.</li><li>• Múltiples especies de microorganismos coexistiendo.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Considerar a la biopelícula como un sistema viscoelástico</li></ul>

---

## **2.7. Objetivo general**

Estudiar teóricamente mediante la construcción de un modelo matemático conjugado la capacidad de degradación de reactores biológicos de lecho empacado para eliminar compuestos contaminantes del biogás.

## **2.8. Objetivos particulares**

- Determinar las principales limitaciones de los modelos matemáticos existentes para el proceso de biofiltración de corrientes gaseosas.
- Estudiar las interacciones en términos de condiciones hidráulicas, de transferencia de masa y reacciones biológicas entre las distintas etapas de tratamiento.
- Construir un modelo matemático para reactores biológicos de lecho empacado para determinar parámetros hidrodinámicos, difusivos y biocinéticos útiles para el escalamiento del proceso.
- Determinar mediante la variación de parámetros cuales son los efectos de mayor importancia en el proceso de tratamiento



# Capítulo 3

## 3. Modelo Físico

### 3.1. Consideraciones generales para la construcción de modelo matemático

Se uso como base las ecuaciones de continuidad, conservación de momento y conservación de especies. Para su estudio se consideró un sistema bidimensional, isotérmico o la liberación de calor es suficientemente pequeño para considerarse isotérmico, estacionario, el fluido en que circula en el micro canal se considera como un fluido incompresible, reacción heterogénea (ocurre en la interfase de la biopelícula), para el análisis del sistema, se consideró un perfil de velocidad totalmente desarrollado.

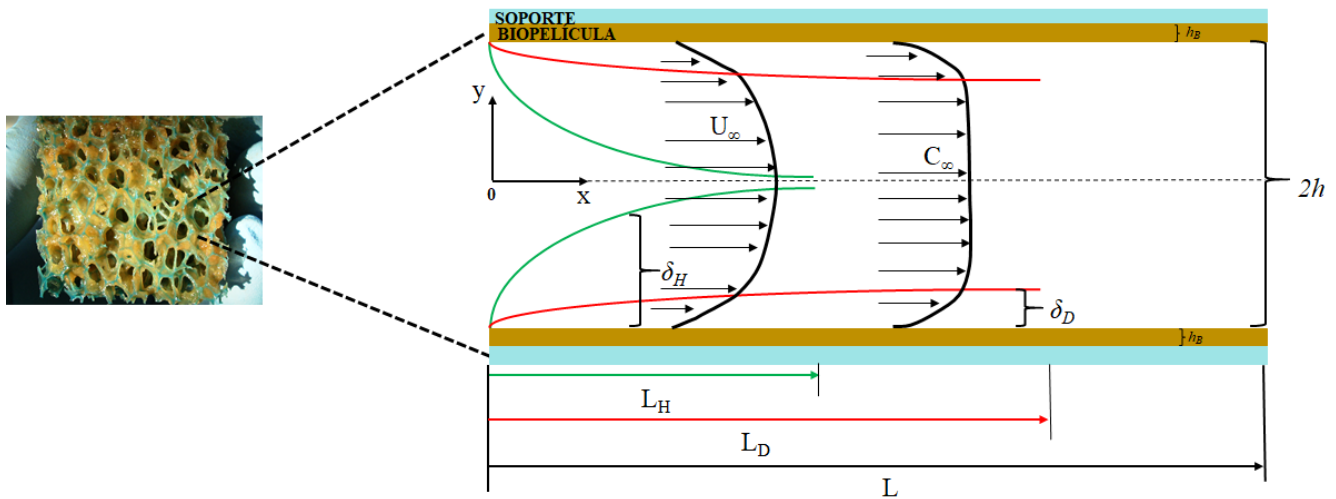


Fig. 12. Proceso de biofiltración de lecho empacado.

Considerando un flujo continuo de un fluido a través de un micro canal en patrón laminar con una longitud total  $L$  y espesor total  $2h$  en cuyas paredes se encuentra inmovilizada una biopelícula de espesor  $h_B$  capaz de degradar el contaminante de  $i$ , como se muestra en la Fig.

12. Al ser un sistema bidimensional se consideró que la simetría permitía usar la parte superior del canal para la construcción de los parámetros adimensionales y utilizar las coordenadas positivas del sistema.  $L_H$ , identifica la longitud de desarrollo de la capa límite hidrodinámica así mismo  $L_D$ , identifica la longitud de desarrollo de la capa límite difusiva.  $\delta_H$  y  $\delta_D$  identifican el espesor de la capa límite hidrodinámica y difusiva respectivamente. En la Fig. 12 se procuró representar que las evoluciones de ambas capas son desiguales, siendo la evolución de la capa hidrodinámica más rápida y tomando una fracción menor de la longitud total considerarla completamente desarrollada.

Como se muestra en la Fig. 13, el origen de las coordenadas se consideró en la entrada del microcanal, así como el origen de las coordenadas de simetría en el centro. Donde  $u$  y  $v$  representan las componentes de la velocidad en la dirección axial “ $x$ ” y transversal “ $y$ ” del fluido y  $C_\infty$  representan la concentración del compuesto contaminante en el seno del fluido.

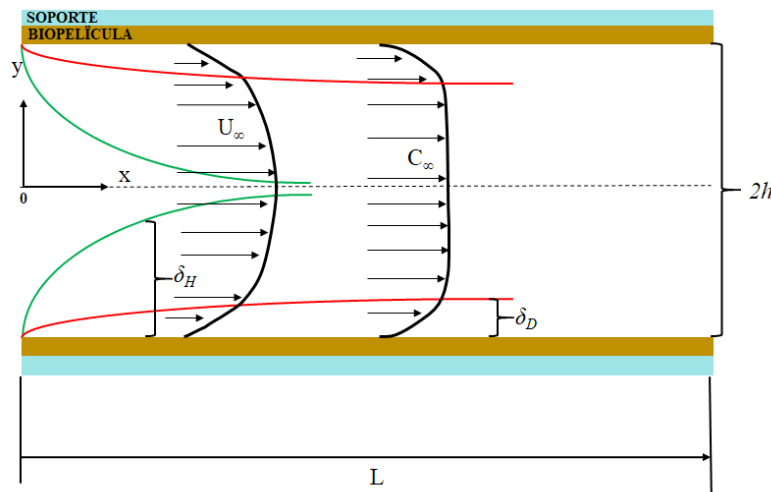


Fig. 13. Proceso de biofiltración de lecho empacado.

### 3.2. Modelo en la zona del fluido

Las ecuaciones de conservación de momento, con las condiciones antes mencionadas, se reducen a la siguiente ecuación

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \frac{dp}{dx} \quad (1)$$

Utilizando las condiciones de frontera propuestas e integrando, la ecuación de conservación de momento se simplifica a:

$$u = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} (y^2 - h^2) \quad (2)$$

Esta última ecuación se conoce como la ecuación de flujo de Poiseuille.  $\frac{dp}{dx}$  representa el gradiente de presión necesario para inducir el principio de movimiento dentro del microcanal y  $\mu$  representa la viscosidad absoluta. Cuando  $x > 0$ , la concentración de la especie  $i$  varía longitudinalmente, así como de manera transversal como una consecuencia de la reacción química del compuesto con la superficie de la biopelícula. El proceso de transferencia de masa del fluido continuo a la biopelícula es debido a la generación de una capa límite delgada de concentración, cuyo espesor es  $\delta_D$  y que se desarrolla a lo largo de la coordenada longitudinal sobre la superficie de la biopelícula, por esta razón se usa un análisis de orden de magnitud para definir las magnitudes más importantes del problema.

#### 3.2.1 Análisis de orden de magnitud

El análisis de escala se usa para estimar los órdenes de magnitud aproximados de los términos involucrados en las ecuaciones gobernantes y de los términos que aparecen en las condiciones

de frontera. Lo cual significa que si una de las incógnitas de interés es el espesor de la capa limite en convección forzada, el propósito del análisis de escala es determinar cualitativamente la dependencia paramétrica del espesor sobre las variables físicas involucradas. A continuación, se presenta el análisis de orden de magnitud para el sistema de biopelícula inmovilizada propuesto, con la finalidad determinar los parámetros asociados al problema, escalas características y la influencia de los parámetros.

Para la construcción de este modelo matemático se consideró que la longitud de desarrollo del perfil hidrodinámico es mucho menor que la longitud necesaria para el desarrollo del perfil difusivo lo cual nos lleva a hacer las siguientes consideraciones, sí:

$$L_H \ll L_D \quad (3)$$

Entonces

$$\delta_H \gg \delta_D \quad (4)$$

Haciendo un análisis de orden de magnitud para las escalas involucradas en el problema, sobre la relación de la longitud hidrodinámica y la longitud de difusión nos muestra que:

$$\frac{L_D}{L_H} = \frac{\frac{u \cdot h^2}{D_H}}{\frac{v}{D_H}} = Sc \quad (5)$$

Por otro lado, sabemos que  $L_H \sim h \cdot Re_h$  o en el caso de ser un número de Reynolds basado en la longitud  $L_H \sim h \cdot Re_L^{1/2}$  y  $L_D \sim h \cdot Pe_D$  [42], Donde  $Re_h = \frac{u \cdot h}{\nu}$  y  $Pe_D = \frac{u \cdot h}{D_D} = Re_h \cdot Sc$ . Donde  $\nu$  es la viscosidad cinemática.

Como se especificó anteriormente, el origen de las coordenadas del sistema coincide con la entrada del microcanal y por lo tanto las capas hidrodinámicas y difusivas coinciden en el origen. Como se ha propuesto, la relación entre el espesor de la capa laminar hidrodinámica y la difusiva se puede definir como:

$$\frac{\delta_D}{\delta_H} \sim Sc^{-1/3} \quad (6)$$

Para la solución del sistema de ecuaciones propuestas se propone el uso de la teoría de la capa límite [56], donde para  $Sc^{-1/3} \ll 1$ , asumimos valores grandes para los números de Schmidt, adoptando de esta manera una formulación de capa límite para predecir el perfil de concentración de  $i$  en el microcanal, mientras que la capa límite de momento alcanza una condición completamente desarrollada. Es por esta razón que se usa el análisis de orden de magnitud para determinar las escalas más importantes en este sistema, particularmente para este sistema la escala más importante a determinar es el espesor de la capa límite difusiva del componente  $i$ .

De la ecuación de Conservación de masa para un compuesto disuelto sabemos que

$$u \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_H \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right), \quad (7)$$

Por la definición presentada en la Ec. (2) y sustituida en la Ec. (7), sabemos que:

$$\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} (y^2 - h^2) \cdot \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_H \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) \quad (8)$$

Ahora, como se representó en la Fig. 13, contrario a la capa límite de conservación de momento, la capa límite de concentración no alcanza a desarrollarse completamente. Para este caso el

proceso de transferencia de masa ocurre en una pequeña región difusiva próxima a la biopelícula donde el orden de magnitud de la velocidad característica del fluido esta dado por:

$U_c \sim \left( \frac{U}{\delta_H} \right) \delta_D \sim \left( -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} h^2 \right) \delta_D$  donde el espesor de la capa límite de conservación de momento

está dada por  $\delta_H \sim L \cdot \text{Re}_L^{-1/2}$ . En otras palabras, el orden de magnitud anterior de la capa límite

de concentración se deduce directamente del balance del orden de magnitud entre los términos de difusión de masa longitudinal convectiva y transversal a través de la capa límite térmica, es

decir,  $U_c \frac{\Delta C_i}{L} \sim D \frac{\Delta C_i}{\delta_D^2}$  donde  $\Delta C_i$  representa el cambio de concentración característico a través

de la concentración la capa límite, los otros parámetros se definieron previamente. De esta manera, podemos reescribir la Ec. (8) como,

$$U_c \left( 1 - \frac{y^2}{h^2} \right) \cdot \frac{\partial C_i}{\partial x} = D_H \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) \quad (9)$$

### 3.3. Balance de especies en la interfase reactiva

Los cambios de concentración difusiva en la mezcla del fluido son causados por la reacción química en la superficie de la biopelícula que permite un consumo finito de la especie  $i$ ; sin embargo, una fracción de  $i$  se difunde al interior de la biopelícula porque, en general, no se consume por completo en la superficie de la biopelícula; por lo tanto, un balance de flujo de masa basado en un análisis de orden de magnitud en la superficie de la biopelícula entre estos términos, conduce a la siguiente relación.

Sabemos que, por un balance de conservación de especies en la interface reactiva, esto es en la proximidad de la biopelícula:

$$\dot{m}_{\text{entrada}} - \dot{m}_{\text{consumo}} - \dot{m}_{\text{salida}} = \dot{m}_{\text{acumulada}} = 0$$

Usando la ley de Fick, la ecuación anterior se puede escribir como:

$$D_{i-Fluido} \left. \frac{\partial C_i}{\partial y} \right|_{y=h} = r_i + D_{i-Bio} \left. \frac{\partial C_{i-Bio}}{\partial y} \right|_{y=h} \quad (10)$$

El término de reacción se define, como se comentó previamente, mediante la ecuación de Monod para la actividad reactiva de microorganismos con la siguiente ecuación:

$$r_i = \frac{\mu_{max} \cdot C_x}{Y_{i/x}} \cdot \frac{C_i}{k_s + C_i} \quad (11)$$

Donde  $\mu_{max}$ , es la Tasa máxima específica de crecimiento celular,  $C_x$  es la concentración de biomasa en el lecho empacado,  $Y_{i/x}$ , Coeficiente de rendimiento biomasa-sustrato,  $k_s$ , es la constante de saturación de sustrato y  $C_i$  es la concentración del sustrato.

### 3.4. Balance de especies en la biopelícula

La ecuación para la conservación de la especie reactiva que se difunde al interior de la biopelícula se puede escribir con ayuda de las consideraciones que se hicieron anteriormente como:

$$D_{i-Bio} \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) = \left( \frac{\mu_{max} \cdot C_x}{Y_{i/x}} \right)_{Bio} \cdot \frac{C_i}{(k_s + C_i)}, \quad (12)$$

Condiciones de frontera

Para el presente problema, las condiciones de frontera necesarias para resolver el conjunto de Ec. (1) a (6) son las siguientes:

$$u(x, y = h) = 0 \quad (13)$$

$$\begin{aligned} p(x=0, y) &= p_{in} \\ p(x=L, y) &= p_{out} \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} C_i(x, y=0) &= C_\infty \\ C_i(x=0, y) &= C_\infty \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C_i}{\partial x} \right|_{x=L} &= 0 \\ C_i(x, y=h) &= C_{i-Bio} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C_i}{\partial y} \right|_{y=h+h_B} &= 0 \\ \left. \frac{\partial C_{i-Bio}}{\partial x} \right|_{x=0} &= \left. \frac{\partial C_{i-Bio}}{\partial x} \right|_{x=L} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Las condiciones de frontera presentadas en las Ec. (13), (14), (15), (16) y (17) representan la condición de no deslizamiento en la pared, condiciones diferentes de presión en la entrada y a la salida del microcanal, condición de concentración constante en la entrada del microcanal, la consumo de la concentración de la especie  $i$  debido a que a la entrada del microcanal toma un valor constante y a la salida de este ha sido consumido por la biopelícula, mientras que en  $y = h + h_B$  tenemos la de impermeabilidad para el soporte, respectivamente.

### 3.5. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la zona del fluido

Para simplificar la ecuación anterior se definen las siguientes variables adimensionales:

$$\chi = \frac{x}{L}, \quad (18)$$

$$C_i^* = \frac{C_i}{C_\infty}, \quad (19)$$

$$\eta = \frac{h-y}{\delta_D}. \quad (20)$$



Análisis de orden de magnitud de  $\eta$ ,

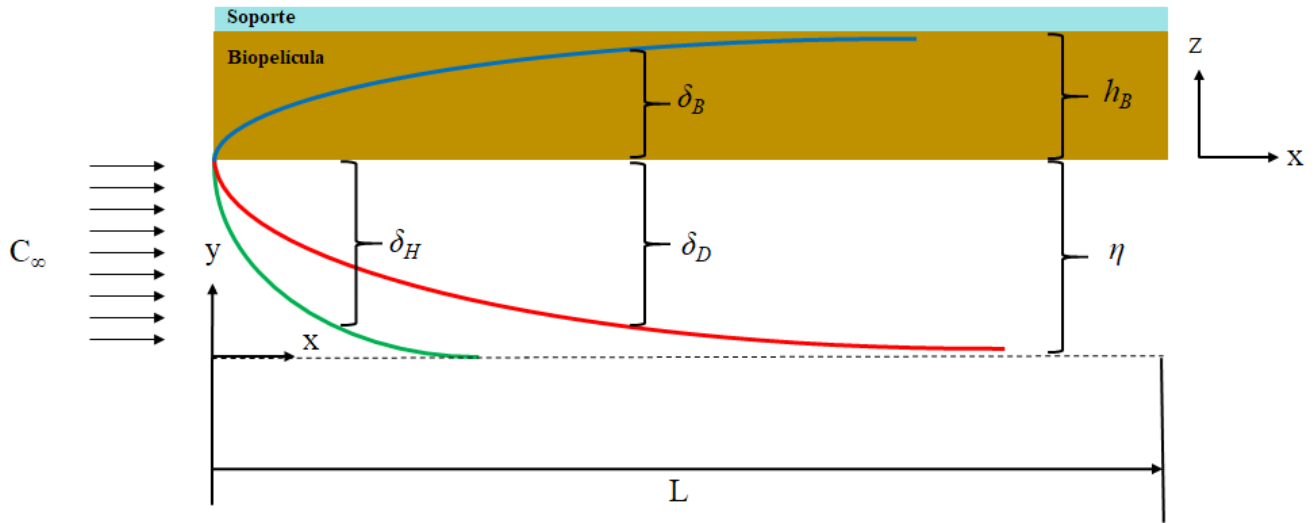


Fig. 14. Ampliación de la zona próxima a la biopelícula de un lecho empacado. La variable " $\eta$ " se mide desde la superficie de la biopelícula.

$$\eta = \frac{h-y}{\delta_D} \sim O(1) \quad (21)$$

Como se puede apreciar de la Ec. (21), esta variable interna necesaria para estudiar el avance y comportamiento de la capa límite difusiva mide la zona interna de esta capa y como se puede apreciar de la misma Fig. 14 se mide desde la superficie de la biopelícula. Adimensionalizando la ecuación (9) se tiene que:

$$U_c \left( 1 - \frac{y^2}{h^2} \right) \frac{C_\infty}{L} \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = D \left( \frac{C_\infty}{L^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{C_\infty}{\delta_D^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right) \quad (22)$$

Considerando además que la variable " $y$ " se puede escribir de la Ec. (20) como:

$$\frac{y}{h} = 1 - \frac{\delta_D}{h} \cdot \eta \quad (23)$$

Podemos sustituir la Ec. (23) en la Ec. (22) y de esta manera obtenemos que,

$$U_c \left( 1 - \left( 1 - \frac{\delta_D}{h} \cdot \eta \right)^2 \right) \frac{C_\infty}{L} \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = D \left( \frac{C_\infty}{L^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{C_\infty}{\delta_D^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right). \quad (24)$$

Considerando entonces que  $\frac{\delta_D}{h} \ll 1$  y ya que la variable interna " $\eta$ " es además de orden de la unidad, entonces podemos linealizar, mediante series de Taylor, el término entre corchetes del lado izquierdo de la ecuación anterior para obtener.

$$U_c \left( 1 + \frac{2\delta_D}{h} \cdot \eta - 1 \right) \frac{C_\infty}{L} \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = D \left( \frac{C_\infty}{L^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{C_\infty}{\delta_D^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right), \quad (25)$$

$$2U_c \frac{\delta_D}{h} \cdot \eta \frac{C_\infty}{L} \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = D \left( \frac{C_\infty}{L^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{C_\infty}{\delta_D^2} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right), \quad (26)$$

Factorizando  $C_\infty$  y  $\delta_D^2$  del lado derecho, despejando este mismo término del lado izquierdo y  $L$ ; nos queda

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \frac{D \cdot L \cdot h}{U_c \cdot \delta_D^3} \left( \left( \frac{\delta_D}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right), \quad (27)$$

Utilizando la Ec. (6), fácilmente se puede demostrar que  $\delta_D^3$  se puede escribir como:

$$\delta_D^3 = L^3 \cdot \text{Re}^{-3/2} \cdot \text{Sc}^{-1}. \quad (28)$$

Se determinó que el grupo paramétrico se reduce a:

$$\text{Re}^{1/2} \cdot \frac{h}{L} \quad (29)$$

Y por un análisis de orden de magnitud

$$\text{Re}^{1/2} \cdot \frac{h}{L} \sim O(1)$$

Entonces (27) se reduce a:

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \left( \left( \frac{\delta_D}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right) \quad (30)$$

Por otro lado, sabemos que  $\frac{\delta_D^2}{L^2}$  se puede definir como:

$$\frac{\delta_D^2}{L^2} = \left( \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3} \right)^2 \quad (31)$$

Sabemos que [42]

$$\text{Re}_L = \text{Re}_h \cdot \frac{L}{h}, \quad (32)$$

Entonces

$$\frac{\delta_D^2}{L^2} = \frac{h}{L} \cdot \text{Re}_h^{-1} \text{Sc}^{-2/3} \quad (33)$$

Pero también sabemos que

$$\text{Re}_h \cdot \text{Sc} = \text{Pe}_D \quad (34)$$

Sustituyendo (34) en (33) obtenemos

$$\frac{\delta_D^2}{L^2} = \frac{h}{L} \cdot \frac{Pe_D^{-1}}{Sc^{-1}} Sc^{-2/3} = \frac{h}{L} \cdot Sc^{-5/3} \cdot Pe_D^{-1}, \quad (35)$$

Por un análisis de orden de magnitud

$$\frac{h}{L} \cdot Sc^{-5/3} \sim O(1)$$

Por lo tanto:

$$\frac{\delta_D^2}{L_D^2} = \frac{1}{Pe_D}, \quad (36)$$

Finalmente, esto nos lleva a:

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \left( \frac{1}{Pe_D} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \right), \quad (37)$$

Para  $Pe_D \gg 1$  el término  $\frac{1}{Pe_D} \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2}$  es irrelevante, por lo tanto, la ecuación se reduce a:

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2}. \quad (38)$$

### 3.6. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la interfase reactiva

Como se muestra en la Fig. 14, para adimensionalizar la zona de la biopelícula es necesario definir la siguiente variable adimensional, que se mide desde la superficie que está en contacto directo con el flujo y que define el dominio de la biopelícula y por consiguiente al igual que la

variable "  $\eta$  " utilizada para la región del fluido, esta variable adimensional también es del orden de la unidad.

$$z = \frac{y-h}{h_B} \quad (39)$$

En términos adimensionales la Ec. (10), se puede escribir como,

$$\left. \frac{\partial C_i^*}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = - \left[ \frac{\mu_{\max} \cdot C_x}{Y_{i/x}} \cdot \frac{\delta_D}{D_{i-Fluido}} \right] \cdot \frac{C_i^*}{k_s + C_{i,o} \cdot C_i^*} + \frac{D_{i-Bio}}{D_{i-Fluido}} \cdot \frac{\delta_D}{h_B} \cdot \left. \frac{\partial C_{i-Bio}^*}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (40)$$

Sabemos que:

$$\frac{\delta_D}{L} = \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3} \quad (41)$$

Sustituyendo (41) en (40)

$$\left. \frac{\partial C_i^*}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = - \left[ \frac{\mu_{\max} \cdot C_x}{Y_{i/x}} \cdot \frac{L}{D_{i-Fluido}} \cdot \left( \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3} \right) \right] \cdot \frac{C_i^*}{k_s (1 + \alpha \cdot C_i^*)} + \left[ \frac{D_{i-Bio}}{D_{i-Fluido}} \cdot \frac{L}{h_B} \cdot \left( \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3} \right) \right] \cdot \left. \frac{\partial C_{i-Bio}^*}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (42)$$

Donde:

- $Da_s$  es el número de Damköhler de superficie definido como;

$$Da_s = \frac{\mu_{\max} \cdot C_x}{k_s \cdot Y_{i/x}} \cdot \frac{L}{D_{i-Fluido}} \cdot \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3}$$

- $\alpha_c = \frac{D_{i-Bio}}{D_{i-Fluido}} \cdot \frac{L}{h_B} \cdot \text{Re}_L^{-1/2} \cdot \text{Sc}^{-1/3}$  es el parámetro conjugado que relaciona las concentraciones del compuesto  $i$  en el seno del líquido y en la interfaz de la biopelícula.

El parámetro  $Da_s$  es una medida de la velocidad de reacción y se denomina número de Damköhler [42], que relaciona la velocidad de reacción con la velocidad de difusión. Si  $Da_s \gg 1$ , esto implica que la tasa de consumo del  $H_2S$  para la reacción de superficie es grande en comparación con la tasa de transferencia de masa del  $H_2S$ , por difusión, esto significa que cualquier cantidad de contaminante que se acerque a la interfase reacciona instantáneamente y lo que domina al proceso será la velocidad de reacción. En el límite opuesto donde  $Da_s \ll 1$ , la tasa de consumo del  $H_2S$  es pequeña en comparación con el flujo de difusión, en este límite, la concentración es constante en todo el sistema.

Mientras que el segundo parámetro,  $\alpha_c$ , define la competencia entre el transporte de masa en el transporte del fluido y el transporte de masa en la biopelícula. Si  $\alpha_c \gg 1$ , esto implica que la difusión de especies en el seno de la biopelícula es grande en comparación con la tasa de difusión de especies en el seno del fluido, esto significa que cualquier cantidad de contaminante que se acerque a la interfase se transporta prácticamente sin resistencia al interior de la biopelícula. En el límite opuesto donde  $\alpha_c \ll 1$ , la difusión de especies en el seno de la biopelícula es pequeña en comparación con el proceso de difusión en el seno del fluido, en este límite, la concentración es constante en todo el sistema. Este último parámetro ayuda a establecer la importancia del problema conjugado entre ambas regiones: para valores finitos de este parámetro, necesitamos predecir simultáneamente ambos perfiles de concentración del compuesto  $i$ . Por esta razón, necesitamos introducir la ecuación de conservación de masa para cada región junto con las condiciones límite correspondientes.

Si definimos:

$$\varepsilon = \frac{h_B}{L}, \quad (43)$$

$$\alpha = \frac{C_{i,o}}{k_s}, \quad (44)$$

Y por lo tanto la Ec. (42) se reduce a:

$$\left. \frac{\partial C_i^*}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = -\frac{Da_s \cdot C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} + \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2} \cdot \left. \frac{\partial C_{i-Bio}^*}{\partial z} \right|_{z=0} \quad (45)$$

Por otro lado, el cambio total de concentración o caída de concentración de  $i$  en el sistema combinado fluido-biopelícula se puede escribir como:  $\Delta C \sim \Delta C_f + \Delta C_B \sim C_\infty - 0 = C_\infty$ . Esto último toma en consideración que la concentración de  $i$  en  $y = h + h_B$  es estrictamente cero, lo que corresponde a asumir una eliminación total de  $i$  en la base de la biopelícula que está en contacto con el soporte. Entonces, combinando las relaciones, se puede demostrar fácilmente que los cambios característicos adimensionales de concentración o caídas están dados por las siguientes relaciones:

$$\frac{\Delta C_f}{C_\infty} \sim \frac{Da_s + \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2}}{1 + \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2}} \quad \text{y} \quad \frac{\Delta C_B}{C_\infty} \sim \frac{1 + Da_s}{1 + \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2}}$$

El sistema conjugado de ecuaciones anterior. (37) - (45) se pueden simplificar considerablemente enfatizando el régimen físico más relevante en casos prácticos: el número de Péclet difusivo es con frecuencia mayor que la unidad. De esta manera, obtenemos la aproximación de la capa límite para valores grandes del número de Péclet, que corresponde a omitir el término de difusión de masa longitudinal en la mezcla del fluido.

### 3.6. Adimensionalización de las ecuaciones Gobernantes en la zona de la biopelícula.

Y en términos de las variables adimensionales la Ec. (12) se rescribe como:

$$\varepsilon^2 \cdot \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial z^2} = \left[ \left( \frac{\mu_{\max} \cdot C_x}{Y_{j/x}} \right)_{Bio} \cdot \frac{h_B^2}{D_{i-Bio} \cdot k_s} \right] \cdot \frac{C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} \quad (46)$$

Donde  $Da_B$  es el número de Damköhler en la biopelícula definido como:

$$Da_B = \left[ \left( \frac{\mu_{\max} \cdot C_x}{Y_{i/x}} \right)_{Bio} \cdot \frac{h_B^2}{D_{i-Bio} \cdot k_s} \right].$$

Entonces la Ec. (46) se reduce a:

$$\varepsilon^2 \cdot \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial z^2} = Da_B \cdot \frac{C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} \quad (47)$$



### 3.7. Ecuaciones adimensionales del modelo matemático con condiciones de frontera

En resumen, para la zona del fluido:

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2} \quad \text{Pe} \gg 1 \quad (48)$$

En la zona de la biopelícula:

$$\varepsilon^2 \cdot \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial z^2} = Da_B \cdot \frac{C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} \quad (49)$$

Con las condiciones de frontera:

$$\eta = \infty \quad C_i^* \approx 1 \quad (50)$$

$$\chi = 0 \quad C_i^* = 1 \quad (51)$$

$$z = \eta = 0 \quad \left. \frac{\partial C_i^*}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = \frac{Da_s \cdot C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} - \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2} \cdot \left. \frac{\partial C_{i-Bio}^*}{\partial z} \right|_{z=0} \quad (52)$$

$$\eta = 0 \quad C_i^* = C_{i-Bio}^* \quad (53)$$

$$\chi = 0 \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = 0 \quad (54)$$

$$\chi = 1 \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = 0 \quad (55)$$

$$z = 1 \quad \frac{\partial C_i^*}{\partial z} = 0 \quad (55)$$

## Capítulo 4.

### 4. Solución numérica del modelo matemático

En este capítulo se presenta la solución numérica del modelo matemático que se desarrolló y presentado en el capítulo 3. La solución del modelo matemático se desarrolló sobre el software Comsol versión 5.3 con número de licencia 3077848. Esta elección se deba a la versatilidad para adaptarse a diferentes fenómenos de transporte, así como la flexibilidad de programación de este.

#### 4.1. Solución numérica del modelo matemático

Las ecuaciones que se construyeron en el modelo matemático se programaron el software mencionado utilizando la siguiente metodología. Para la programación del modelo se partió de una programación típica de Comsol, es decir se definió la geometría, ecuaciones a resolver por el sistema, así como las condiciones de frontera para hacer la solución del modelo matemático. Utilizando el módulo de matemáticas del software se realizó la programación del modelo. A continuación, se presentan la adaptación del modelo matemático a las ecuaciones preprogramadas del software y como se fueron adaptando, así como la programación de las condiciones de frontera.

##### 4.1.1. Para la zona del fluido

Se determino que en la zona del fluido la Ec. (9) para valores de  $Pe \gg 1$  debe ser:

$$2 \cdot \eta \frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \eta^2}, \quad Pe \gg 1 \quad (42)$$

Para adaptar las ecuaciones generales programadas en el software se deben hacer las siguientes consideraciones.

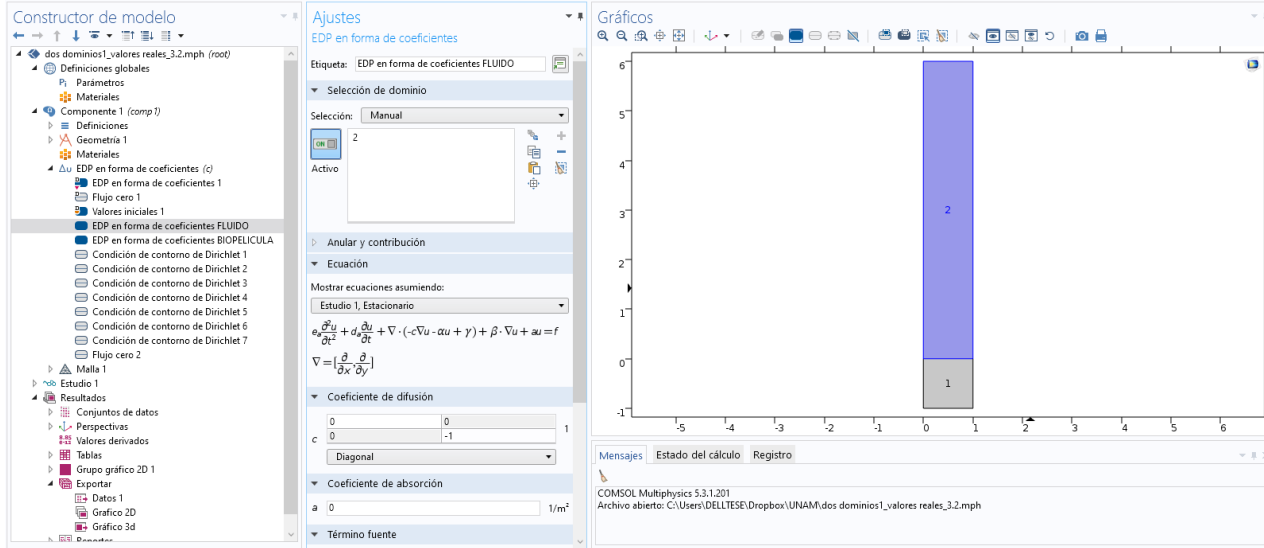


Fig. 15. Programación de las ecuaciones generales de la zona de fluido en Comsol Multiphysics.

La zona que se muestra en azul y que se identifica como la geometría 2 en la Fig. 15 se tiene la ecuación preprogramada con la siguiente estructura:

$$\rho_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f, \quad (56)$$

donde el operador  $\nabla$  se define como:

$$\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right], \quad (57)$$

Para reducir la Ec. (56) general programada en Comsol a la construcción del modelo matemático se definieron los siguientes valores  $\rho_a = 0$ ,  $d_a = 0$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $a = 0$ ,  $f = 0$ .

Entonces la Ec. (56) se reduce a:

$$\nabla \cdot (-c \nabla u) + \beta \cdot \nabla u = 0. \quad (58)$$

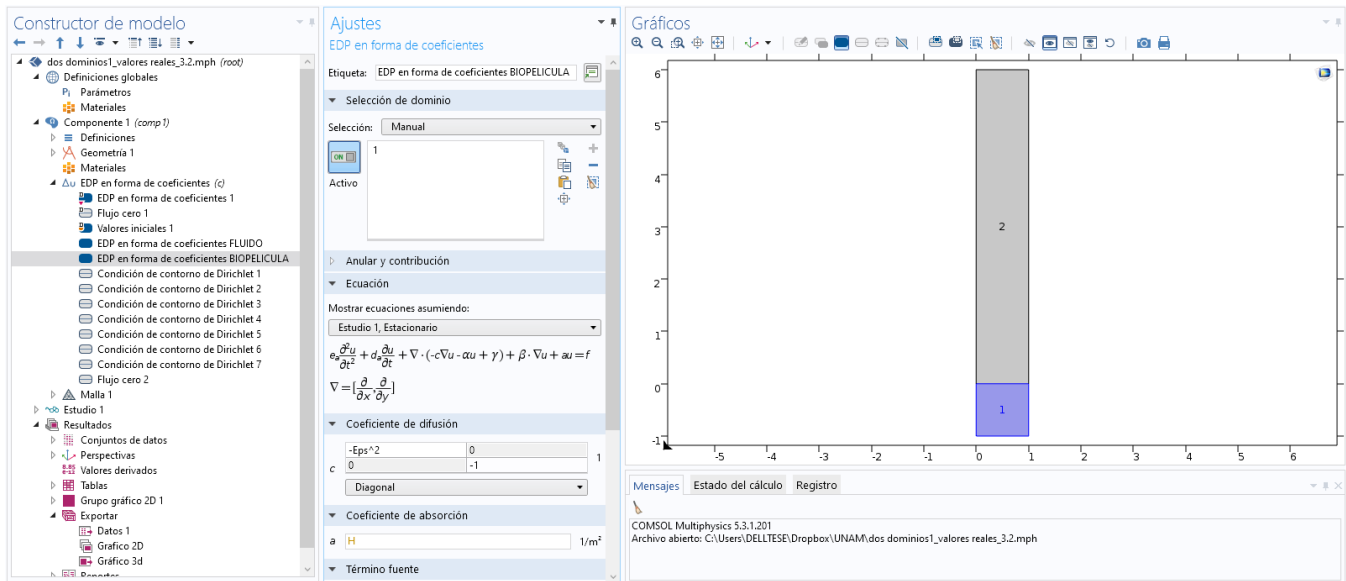
La constante “c” está programada en forma diagonal para dejar activo que  $c_x = 0$  y  $c_y = -1$  de tal forma que  $0 \cdot \frac{\partial u}{\partial x}$  y  $-1 \cdot \frac{\partial u}{\partial y}$ . Para la constante “β”; está programada en forma diagonal para dejar activo que  $\chi$  de tal forma que  $-2 \cdot y \cdot \frac{\partial u}{\partial x}$  y  $0 \cdot \frac{\partial u}{\partial y}$ .

#### 4.1.2. Para la zona de la biopelícula

Se determino que en la zona de la biopelícula la Ec. (47) tiene la siguiente estructura:

$$\varepsilon^2 \cdot \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2 C_i^*}{\partial z^2} = Da_B \cdot \frac{C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} \quad (47)$$

La zona que se muestra en azul y que se identifica como la geometría 1 en la Fig. 16 se tiene la ecuación preprogramada con la estructura que se presenta en la Ec. (59).



**Fig. 16. Programación de las ecuaciones generales de la zona de la biopelícula en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics.**

$$\rho_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f, \quad (59)$$

Para reducir la Ec. (59) general programada en Comsol a la construcción del modelo matemático se definieron los siguientes valores  $\rho_a = 0$ ,  $d_a = 0$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $a = 0$ ,  $f = 0$ .

Entonces la ecuación general se reduce a:

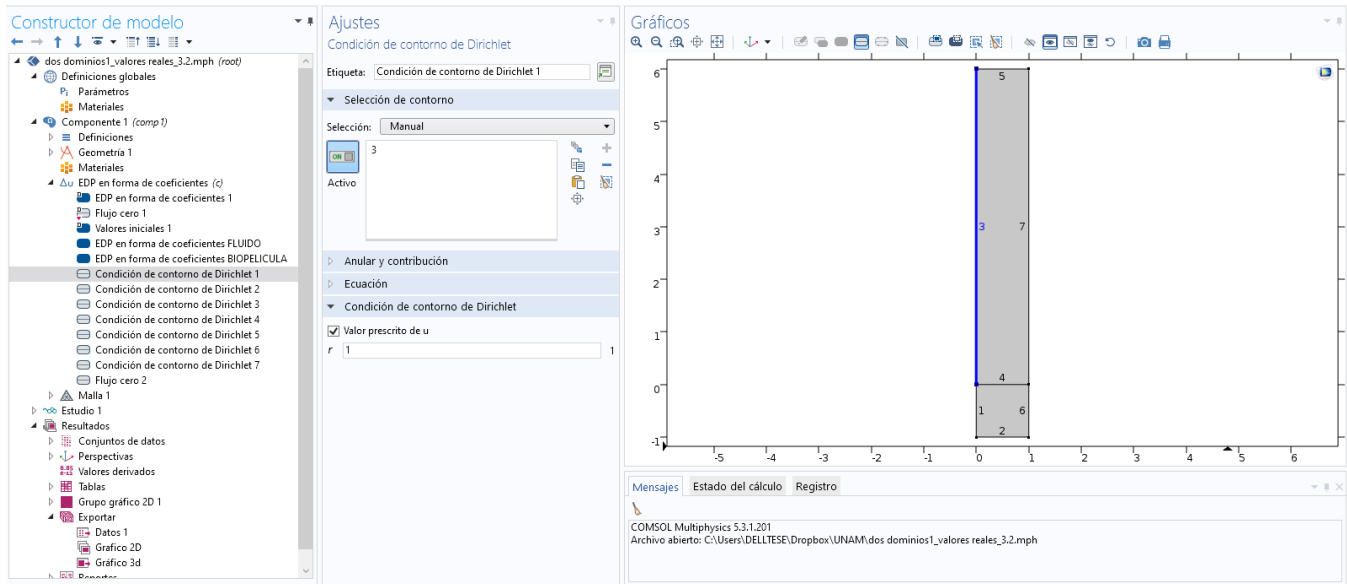
$$\nabla \cdot (-c \nabla u) + au = 0. \quad (60)$$

Para este caso, la constante “ $c$ ” está programada en forma diagonal para dejar activo que  $c_x = -\varepsilon^2$  y  $c_y = -1$  de tal forma que  $-\varepsilon^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial x}$  y  $-1 \cdot \frac{\partial u}{\partial y}$ . Las soluciones iniciales del modelo están restringidas a algunos casos específicos, se forzó a “ $a = 0$ ” está programada en forma diagonal para dejarlo inactivo.

#### 4.1.3. Condiciones de frontera programadas

##### *Condiciones de frontera en la zona del fluido*

Las condiciones de frontera dentro del código del software que se presentaron en el capítulo 3, Ec. (49), Ec. (50) y Ec. (52). Corresponden dentro de la geometría a las fronteras señaladas con los números 3, 5 y 7 como se muestra en la Fig. 17.



**Fig. 17. Programación de las condiciones de frontera de la zona del fluido en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 3 es el punto de entrada del fluido ( $\chi = 0$ ), 7 la frontera de salida ( $\chi = 1$ ), 5 es la zona media del canal ( $\eta = \infty$ ).**

En la programación de COMSOL el conjunto de condiciones de frontera anteriores se presentan en la Tabla 5.

**Tabla 5. Condiciones de frontera programadas en Comsol para la Zona del fluido**

Valor de la dimensión	Condición de frontera
$\chi = 0$	$C_i^* = 1; u = r = 1$
$\chi = 1$	$u = r = u\chi + u = \frac{\partial u}{\partial \chi} + u$
$\eta = \infty$	$C_i^* = 1; u = r = 1$

### *Condiciones de frontera en la interfase Fluido-Biopelícula*

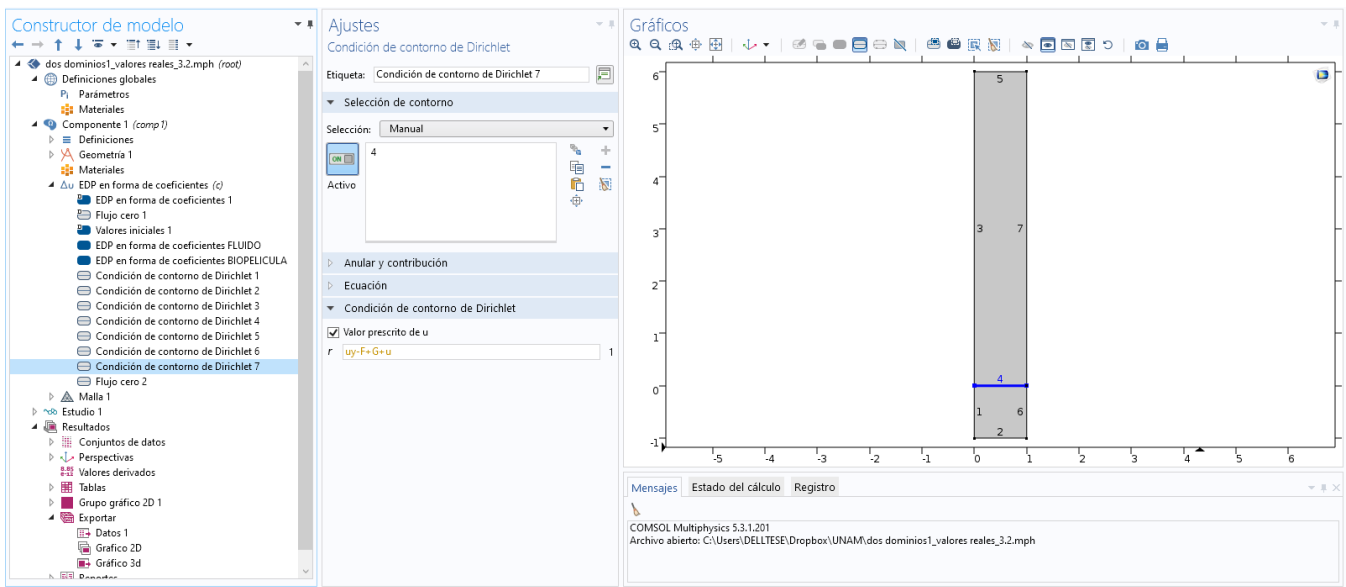
Como se muestra en la Ec. (51), esta condición de frontera es de especial interés en este estudio, debido a que en esta frontera se incluye la adaptación del modelo matemático general

programado en el software a las ecuaciones del modelo construido y es en este punto donde se incluyen los parámetros conjugados que se describen en el Capítulo 3 de este trabajo.

La Ec. (51) tiene la siguiente estructura:

$$\left. \frac{\partial C_i^*}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = \frac{Da_s \cdot C_i^*}{(1 + \alpha \cdot C_i^*)} - \frac{\alpha_c}{\varepsilon^2} \cdot \left. \frac{\partial C_{i-Bio}^*}{\partial z} \right|_{z=0} \quad (51)$$

En la Fig. 18 se presenta interfase Fluido – Biopelícula, numerada con el 4, que representa la zona de intercambio directo de especies entre el fluido y la biopelícula.



**Fig. 18. Programación de la condición de frontera de la zona del fluido en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 4 es la zona donde convergen el fluido y la biopelícula ( $z = 0$ )**

De acuerdo con la programación general del software, cuando  $z = \eta = 0$ :

$$u = r = uy - F + G + u = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{Das * u}{1 + Alfa * u} + \frac{Alfa_c}{Eps * Eps} * \frac{\partial u}{\partial y} + u \quad (61)$$

Simplificando la Ec (61) tenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{Da_s * u}{1 + Alfa * u} - \frac{Alfa_c}{Eps^2} * \frac{\partial u}{\partial y} + u - u \quad (62)$$

En esta última ecuación se encuentran programados los parámetros  $Da_s$  y  $\alpha_c$  que como se explicó anteriormente su utilidad reside en analizar el contraste de fenómenos de difusión de especies desde el fluido hacia la biopelícula y la peso que tienen la biorreacción en el proceso global. Los valores para el  $Da_s$   $Da_s$  como para el  $\alpha_c$  y  $\alpha$  se calcularon de manera independiente usando datos de referencia como se muestra en la Tabla 6.

**Tabla 6. Valores de referencia de los parámetros para resolver las ecuaciones del modelo matemático.**

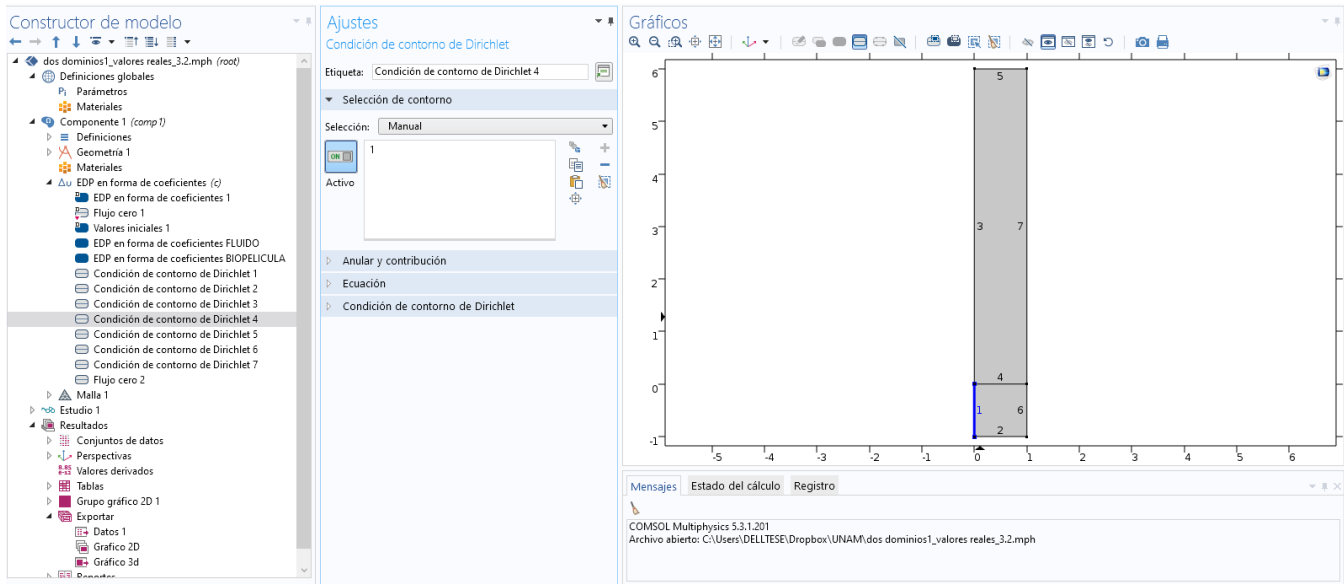
Parámetro	Valor	Referencia
$D_{i-Bio}$	$2.95 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$ $1.99 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$	[36][37]
$D_{i-Fluido}$	$5.796 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$ $6.30 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$	[22] [57]
$L_H$	$9 \times 10^{-3} - 1.35 \text{ m}$	*
$\nu$	$1.01 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	[58]
$\delta_B$	$1-150 \times 10^{-6} \text{ m}$	**
$h$	$9 \times 10^{-6} - 135 \times 10^{-5} \text{ m}$	
$\Delta p$	$1-2 \text{ cm H}_2\text{O} = 196.13 \text{ Pa}$	[8]
$\mu$	$8.91 \text{ E}^{-4} \text{ Kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	[58]
$h_B$	$1-150 \text{ } \mu\text{m}$	[37]
$C_{i,o}$	$50-400 \text{ g H}_2\text{S m}^{-3} \text{ h}^{-1}$	[59] [60]
$\mu_{max}$	$0.1-1.0 \text{ h}^{-1}$	[37]
$Y_{i/x}$	$2.0-8.0 \text{ g celus S/mol S}$	[37]
$C_x$	$65.1 \text{ (kg m}^{-3}\text{)}$	[36]
	$0.1-0.25 \text{ (g m}^{-3}\text{)}$	[61]
	$0.1-100 \text{ (g L}^{-1}\text{)}$	[37]
$k_s$	$0.0279 \text{ g m}^{-3}$	[61] [37]

\*Se derivó de asumir que  $\tilde{\epsilon} = \frac{h}{L_H} < 0.001$  \*\*Se deriva de la solución del modelo, se consideró que el fluido es 9 veces más grande que la zona de la biopelícula.



## Condiciones de Frontera en la Zona de la biopelícula

Para la programación de las condiciones de frontera que se presentan en las Ec. (54) y (55) se tomaron los contornos indicados en la Fig 19 con los números 1, 2 y 6.



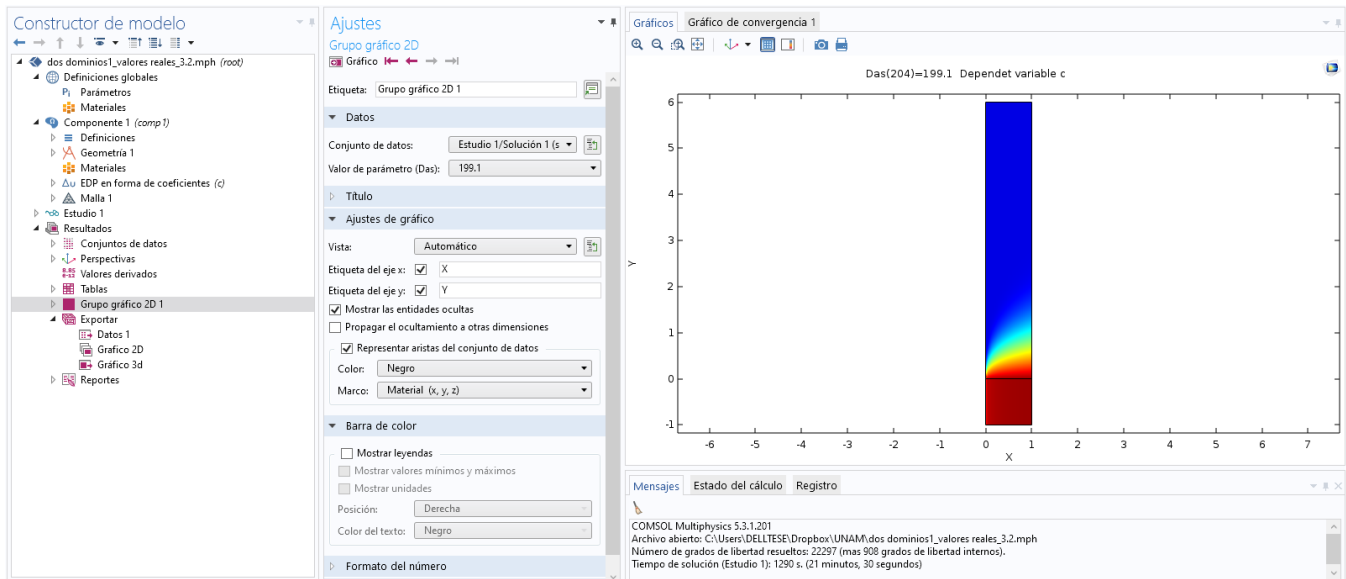
**Fig. 19. Programación de las condiciones de frontera de la zona de la biopelícula en la interfaz gráfica de Comsol Multiphysics. La frontera 1 es el punto de contacto del inicio de la corriente con la biopelícula ( $\chi = 0$ ), 6 la frontera de salida ( $\chi = 1$ ), 2 es la zona del soporte inerte ( $z = 1$ ).**

Como se presenta en la Tabla 7, cuando la coordenada adimensional  $\chi = 0$ , en el dominio de la biopelícula el sistema está en la entrada del microcanal donde la concentración es cero, en el otro extremo cuando  $\chi = 1$  el sistema se encuentra a la salida y la concentración depende de la actividad en la biopelícula a lo largo del eje axial. Finalmente, cuando  $z = 1$ , el sistema se encuentra en el soporte de la biopelícula que es un material inerte.

**Tabla 7. Condiciones de frontera programadas en Comsol para la Zona de la biopelícula.**

Valor de la dimensión	Condición de frontera
$\chi = 0$	$\frac{\partial C_i^*}{\partial \chi} = 0$
$\chi = 1$	$u = r = u\chi + u = \frac{\partial u}{\partial \chi} + u$
$z = 1$	$\frac{\partial C_i^*}{\partial z} = 0$

El sistema de ecuaciones programadas en Comsol se resolvieron utilizando el método de Newton no lineal, utilizando un método de malla extrafina con una tolerancia de 0.001. En la Fig. 20 se presenta el resultado de la solución numérica típica que nos representa la variación de la concentración a través del microcanal.



**Fig. 20. Solución numérica general para el modelo matemático usando Comsol Multiphysics.**

## Análisis de sensibilidad paramétrica

Una de las ventajas de usar el Comsol es que permite hacer un barrido en un intervalo definido de alguno de los valores, para el caso de estudio se realizaron dos etapas, en la primera etapa se fijaron los valores de  $\alpha_c$ ,  $\alpha$  y  $\varepsilon$ . Se hizo un barrido del valor del  $Da_s$  desde valores próximos a cero y se llevó a valores con tres órdenes de magnitud superiores, como se muestra en la Fig. 21, esto con la finalidad de encontrar los valores donde la solución numérica es estable.

En la segunda etapa, con el valor estable para  $Da_s$  se realizó un barrido paramétrico del valor de  $\alpha_c$ . Ambas etapas se realizaron para poder identificar por un lado los valores que relevantes del proceso y por otro lado para poder identificar a cuál de los dos parámetros en los que se hizo el estudio de barrido, el modelo matemático es más sensible.

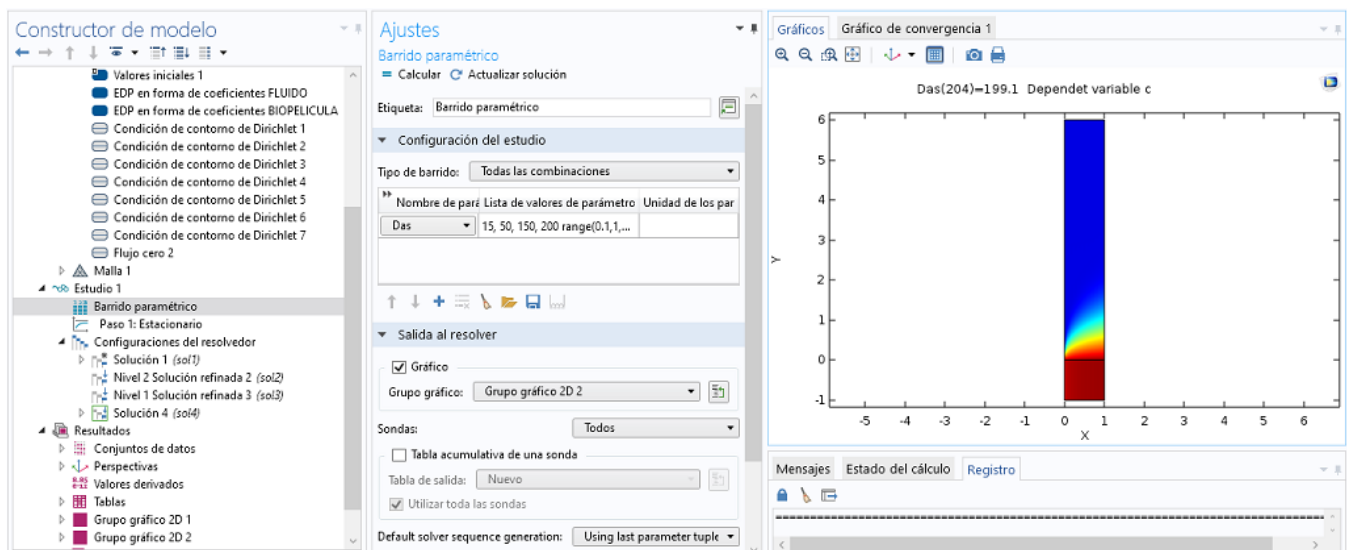


Fig. 21. Programación de estudio de barrido paramétrico en Comsol.

## Capítulo 5.

### 5. Resultados de la solución del modelo matemático

En este capítulo se presentan los resultados de la solución numérica del modelo matemático que se construyó para el proceso de biofiltración, usando la metodología que se presentó en el capítulo 4, mediante el uso del software Comsol 5.3a con el módulo de matemáticas

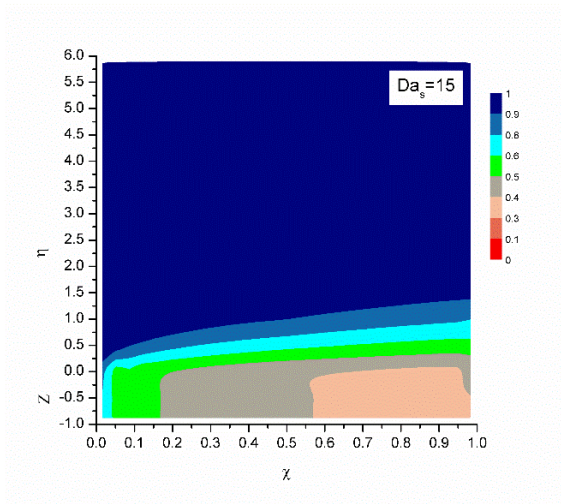
#### 5. Resultados

##### 5.1. Variación paramétrica de $Da_s$

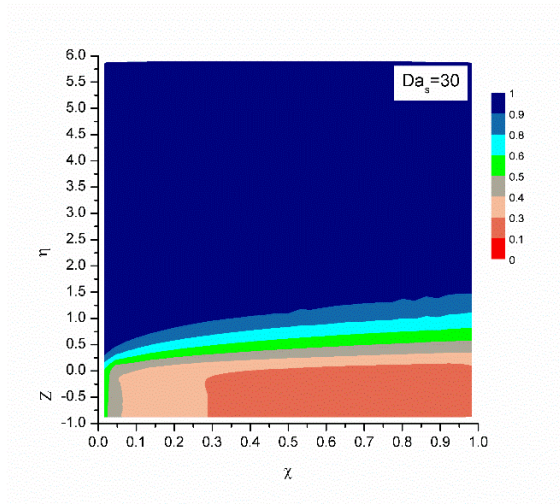
En el conjunto de la Fig. 21, mostramos los perfiles de concentración del sulfuro de hidrógeno en función de la coordenada transversal adimensional  $\eta$ , que solo es válida para la región del fluido continuo, mientras que usamos la coordenada transversal adimensional  $z$ , para la región de la biopelícula. En estas figuras, el número de Damköhler, asume también valores diferentes ( $Da_s = 15, 30, 50, 100$  y  $200$ ). Debemos recordar que este último parámetro mide la competencia entre la velocidad de reacción y la velocidad de difusión molecular. En el análisis de la variación paramétrica del  $Da_s$ , como se muestra en la Fig. 21, la reacción que se presenta sobre la superficie de la biopelícula en contacto con el biogás, podemos observar que con aumento del número de Damköhler la concentración de compuesto contaminante se difunde hacia el interior de la biopelícula, esto nos indica que la reacción de transformación de la biopelícula es poco vigorosa, que se demuestra con los colores de la Fig. 21, a). Cuando el reactivo logra difundirse al interior de la biopelícula esto se representa en un color con concentración alta (ver Fig. 21, a)-e)). A medida que el valor numérico del parámetro,  $Da_s$ , crece en orden de magnitud se observa que la concentración del reactivo en el interior de la biopelícula es prácticamente nula. El barrido numérico se realizó para valores mayores a 200; sin embargo, es a partir de este valor que los valores de la concentración no cambian. Se consideró entonces que este último valor de  $Da_s$  es el valor donde la solución es estable, es en este límite numérico

que la velocidad de la biorreacción es tan alta para reaccionar casi de manera instantánea con el reactivo impidiendo que este se difunda al interior de la biopelícula.

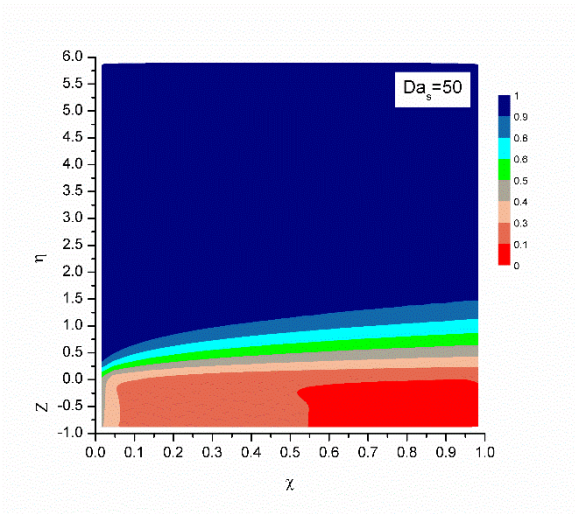
a)



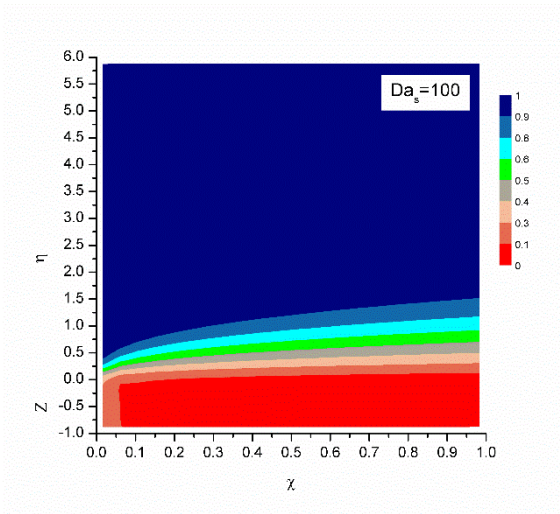
b)



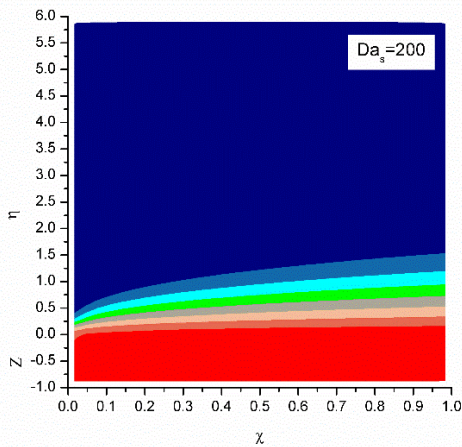
c)



d)



e)

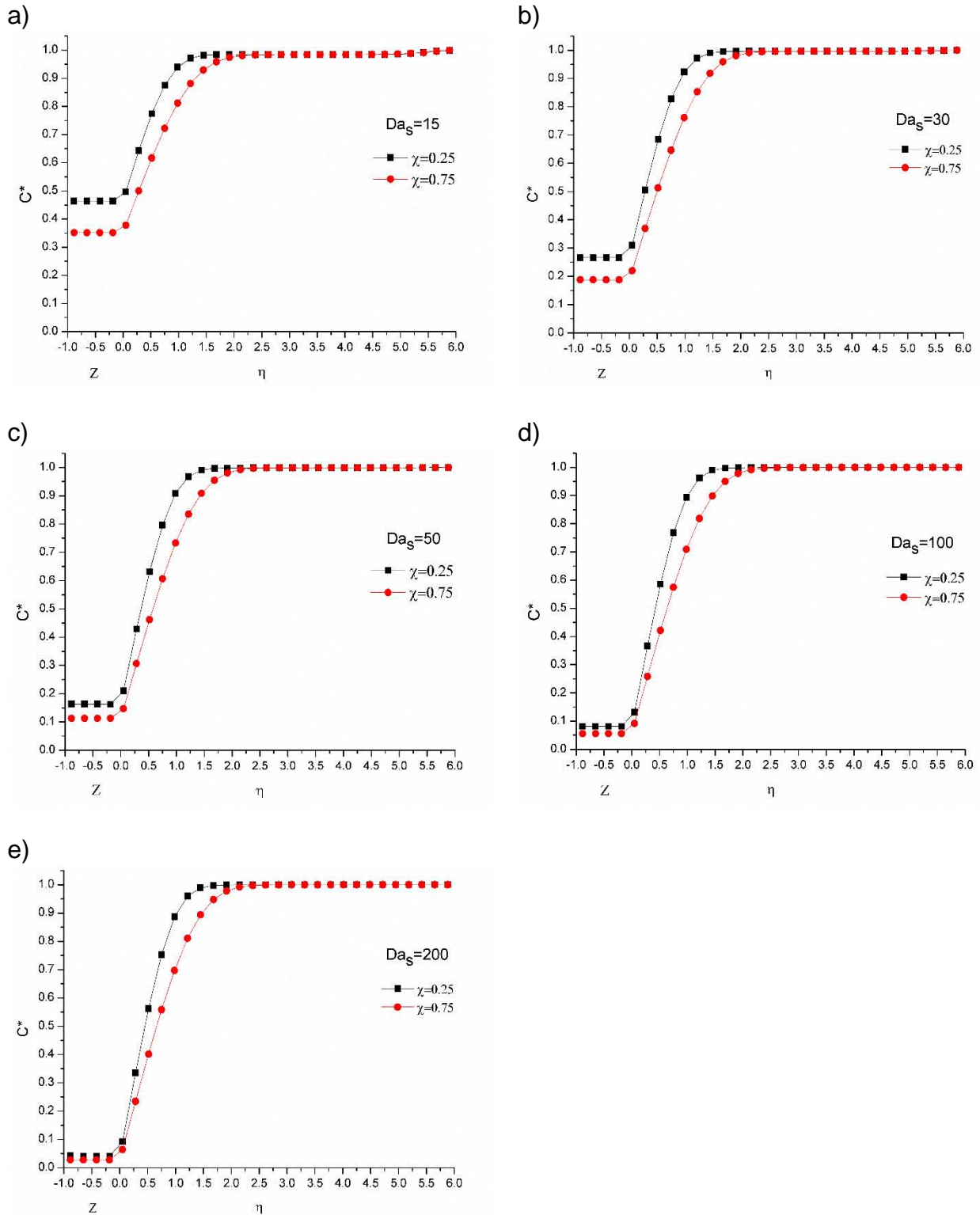


**Fig. 22. Representación gráfica de la solución numérica del modelo matemático, a)  $Da_s=15$ , b)  $Da_s=30$ , c)  $Da_s=50$ , d)  $Da_s=100$ , e)  $Da_s=200$ .**

Para analizar con más detalle la progresión de la degradación del compuesto indeseado, se realizó un filtrado de los datos de concentración a dos valores de  $\chi$ ; estos fueron  $\chi = 0.25$  y  $\chi = 0.75$ , en la coordenada longitudinal representan puntos posteriores al inicio y el final del canal. De este análisis de evolución de concentración se puede observar que a medida que el número de  $Da_s$  aumenta, la concentración decae en las proximidades de la entrada del canal. En estas figura para ambas posiciones longitudinales ( $\chi = 0.25$  y  $0.75$ ), mostramos curvas típicas en forma de "S", comportamiento que indica dos hechos importantes: a) una región delgada (aproximadamente en el rango  $0 \leq \eta \leq 1$ ), donde se producen los mayores cambios del perfil de concentración: fuera de este intervalo, el perfil de concentración asume prácticamente una distribución uniforme y b) una tendencia prácticamente uniforme por la concentración del contaminante en la región de la biopelícula ( $-1 \leq z \leq 0$ ).

Esto confirma lo que se presenta en la Fig. 21 que está relacionado con el que la reacción domina todo el proceso y la difusión se vuelve menos relevante. En la Fig. 22 a) se puede atribuir a que el proceso se debe a una reacción lenta, debido a una biopelícula poco activa, lo que tiene como consecuencia la presencia del compuesto contaminante dentro de la biopelícula por un proceso de difusión al interior de esta. Cuando la coordenada longitudinal se incrementa

desde  $\chi = 0,25$  hasta  $0,75$ , la concentración en la región de la biopelícula alcanza en la base del soporte aproximadamente los valores de  $0.46$  y  $0.35$ , respectivamente. Lo anterior indica que aguas abajo del microcanal y en la dirección creciente de la coordenada longitudinal, la concentración de  $H_2S$  disminuye cuando la reacción química en la superficie de la biopelícula consume esta especie y por lo tanto en posiciones posteriores aguas abajo hay menor concentración de este componente. para llevar a cabo la reacción. Por ejemplo, obtenemos una reducción del  $23.91\%$  entre ambas posiciones longitudinales y para una posición particular  $\chi = 0.75$ , alcanzamos una reducción global del  $65\%$ , cuando pasamos de un valor de concentración de  $C^* = 1$  a  $C^* = 0.35$ , en la base del soporte. En la Fig. 22, b), mostramos nuevamente los perfiles de concentración versus las coordenadas transversales adimensionales  $\eta$  y  $z$ ; sin embargo, la única diferencia con la a) anterior es el valor del número de Damköhler. En este caso,  $Das = 30$  y  $15$  para ambas posiciones longitudinales  $\chi = 0.25$  y  $0.75$ , los valores residuales del sulfuro de hidrógeno en la base de la biopelícula son más reducidos en comparación con el caso presentado en la Fig. 22, a). En este caso, los valores residuales de la concentración son aproximadamente  $0.27$  y  $0.19$  para las posiciones longitudinales  $\chi = 0,25$  y  $0,75$ ; respectivamente. Aquí, la diferencia entre ambas posiciones es del orden del  $29,62\%$ , aumentando ligeramente con respecto al caso anterior. Por el otro lado cuando la biopelícula es muy activa (Fig. 22, e)), lo cual se puede dar bajo diferentes escenarios como una cantidad elevada de bacterias o una afinidad alta de la biomasa por el sustrato, este último prácticamente desaparece en la superficie de la biopelícula.



**Fig. 23.** Variación de la concentración en los valores  $\chi = 0.25$  y  $\chi = 0.75$  para, a)  $Da_s=15$ , b)  $Da_s=30$ , c)  $Da_s=50$ , d)  $Da_s=100$ , e)  $Da_s=200$ .



Lo anterior demuestra el impacto que tiene la presencia del número de Damköhler en las ecuaciones gobernantes: para valores crecientes de este parámetro las expectativas de un mayor consumo de sulfuro de hidrógeno son más favorables y por tanto valores más altos para este parámetro fundamental favorecen el proceso de eliminación total de este componente químico que en muchos procesos bioquímicos es indispensable su eliminación.

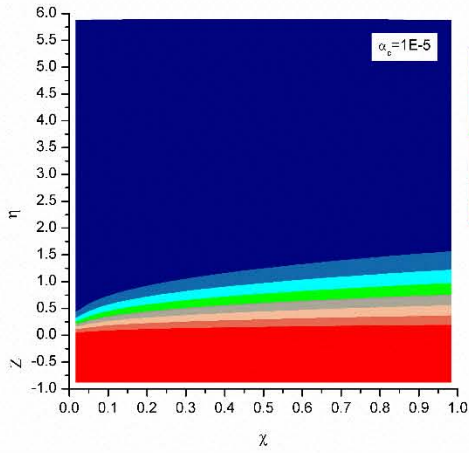
## 5.2 Variación paramétrica de $\alpha_c$

La segunda serie del análisis paramétrico de este estudio se enfocó en determinar la influencia física que tiene el parámetro conjugado,  $\alpha_c$ , con esto se pretende determinar con cuál de los dos parámetros es más sensible el modelo matemático desarrollado. Contrario a lo que se muestra en el estudio de variación del  $Da_s$ , el barrido de  $\alpha_c$  demostró inestabilidad en la solución numérica del modelo cuando se le daban valores de cercanos a 1.

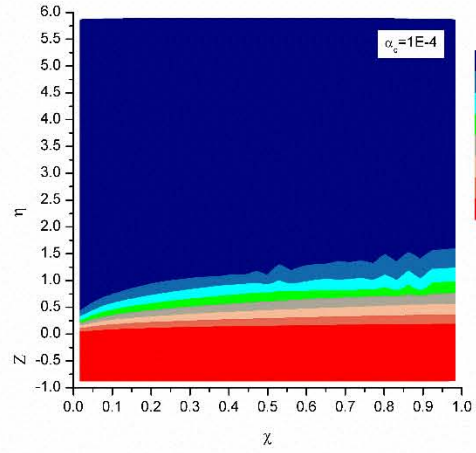
Usualmente los modelos matemáticos de biopelículas consideran que los coeficientes de difusión al interior de la biopelícula se pueden considerar con los mismos valores de como se presenta la difusión en el fluido [44], sin embargo, la biopelícula como se ha propuesto por distintos autores no tiene las mismas propiedades, morfológicamente esos sistemas son complejos [62]–[64], específicamente la viscosidad, al ser un medio formado a partir de SPE, implica que la capacidad de difusión es estrictamente menor que el fluido continuo en contacto con ella.

Los valores de la solución numérica son estables; es decir, cuando el valor del coeficiente de difusión del fluido es más grande que el coeficiente de difusión de la biopelícula, lo cual induce a valores pequeños del parámetro conjugado  $\alpha_c$ . Adicionalmente con las condiciones que se programó el modelo matemático los valores de  $\alpha_c$  próximos a uno implicarían que parte del sustrato se estaría difundiendo al interior de la biopelícula.

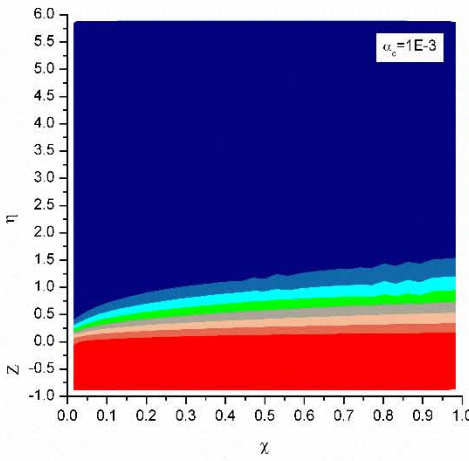
a)



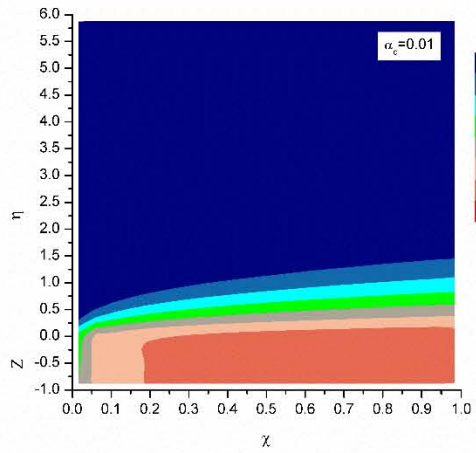
b)



c)



d)



e)

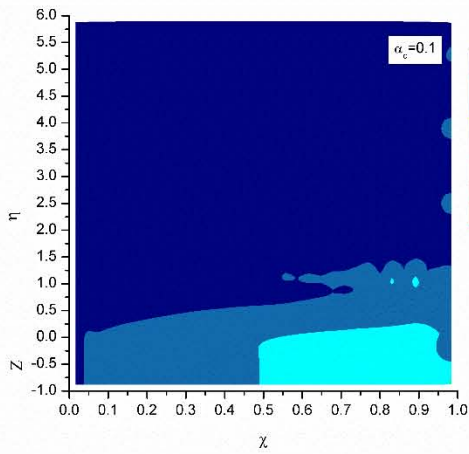
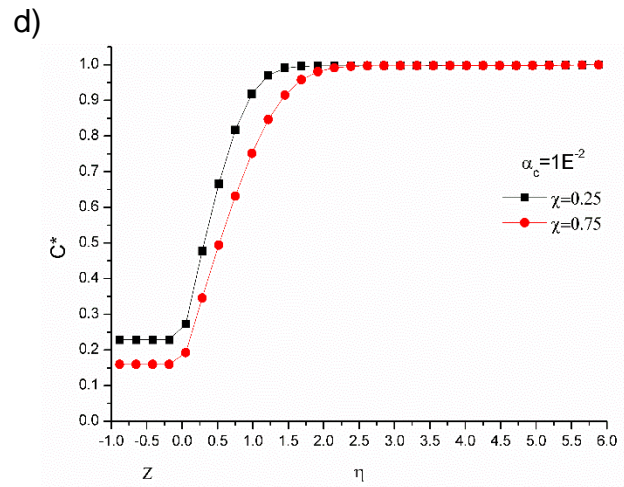
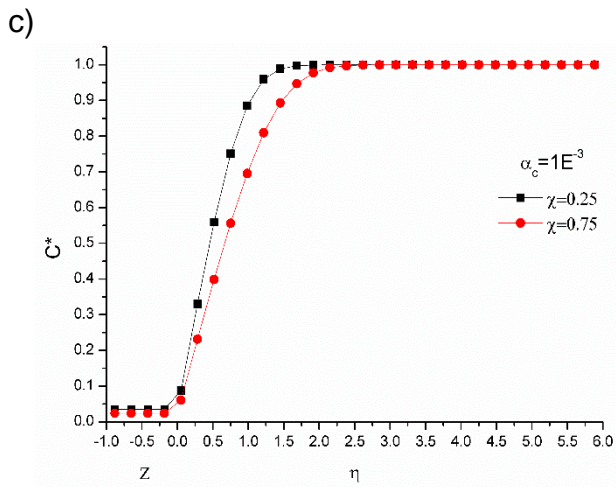
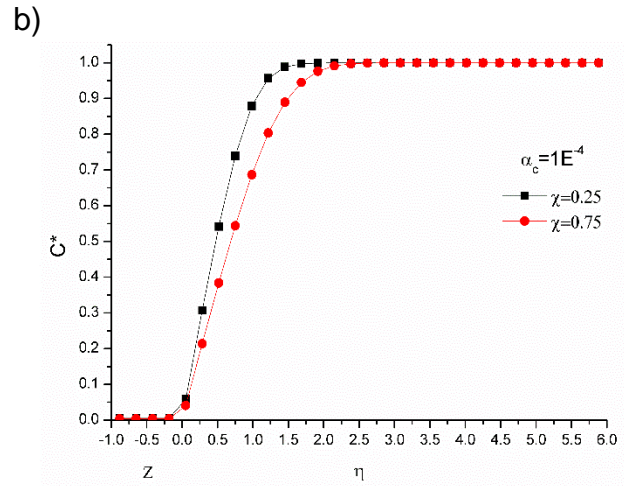
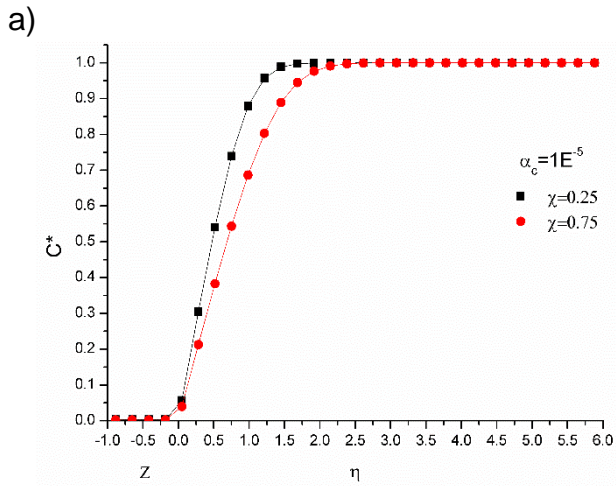
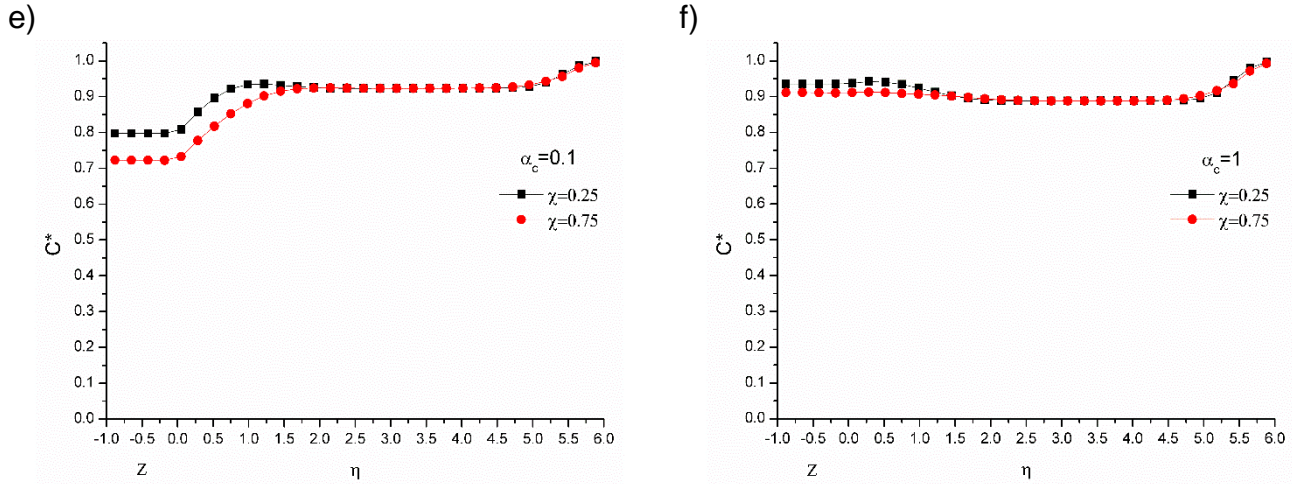


Fig. 24. Representación gráfica de la solución numérica del modelo matemático para la variación del parámetro  $\alpha_c$ ,

a)  $\alpha_c = 1 \times 10^{-5}$ , b)  $\alpha_c = 1 \times 10^{-4}$ , c)  $\alpha_c = 1 \times 10^{-3}$ , d)  $\alpha_c = 1 \times 10^{-2}$ , e)  $\alpha_c = 1 \times 10^{-1}$ .

Basados en los resultados de la variación paramétrica de  $\alpha_c$  se realizó un análisis de la variación del parámetro toman dos puntos de la coordenada longitudinal, cuando  $\chi = 0.25$  y cuando  $\chi = 0.75$ , la elección de estos valores se debe que se procuró elegir puntos donde las inestabilidades de entrada o de salida no fueran relevantes.



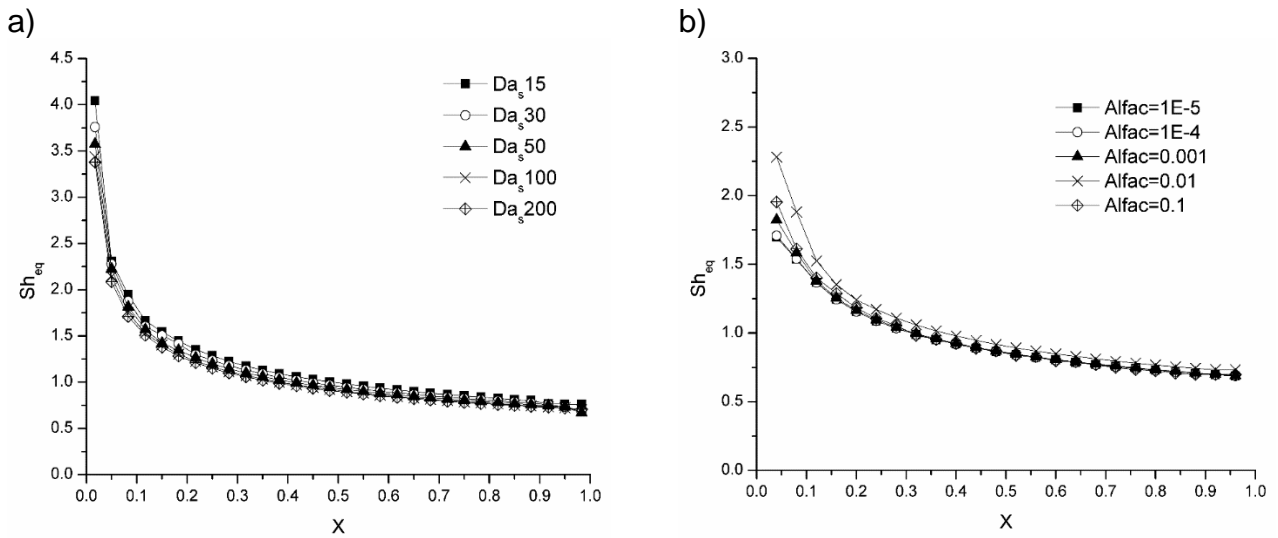


**Fig. 25. Variación de la concentración en los valores  $\chi = 0.25$  y  $\chi = 0.75$  para, a)  $\alpha_c = 1E^{-5}$ , b)  $\alpha_c = 1E^{-4}$ , c)  $\alpha_c = 1E^{-3}$ , d)  $\alpha_c = 1E^{-2}$ , e)  $\alpha_c = 1E^{-1}$ , f)  $\alpha_c = 1$ .**

Los resultados muestran que los valores apropiados son valores bajos de  $\alpha_c$ , Fig. 24, a)-b), en ellos se muestra que la región de consumo del contaminante es prácticamente sobre la superficie de la biopelícula sin que exista penetración del contaminante al interior de esta. En el caso contrario, los valores altos de  $\alpha_c$ , ocasionan que exista una presencia abundante del contaminante llegando a saturar a la biopelícula Fig. 24, e). Con esto se demuestra que aproximar los valores de la difusión en la biopelícula a valores de la difusión de la fase continua pueden inducir un error.

### 5.3. Cálculo del número de Sherwood

Finalmente con los datos numéricos calculados fue posible determinar el parámetro adimensional de Sherwood,  $Sh$ , cuya utilidad reside en la cuantificación de la resistencia de especies entre el flujo convectivo y el flujo difusivo de especies utilizando la variación tanto de  $Da_s$  como de  $\alpha_c$  para analizar su influencia.



**Fig. 26. Distribución del número de Sherwood local o transferencia de masa adimensional del contaminante,  $Sh$ , en función de la coordenada longitudinal adimensional, a) para diferentes valores del número de Damköhler  $Da_s$ , b) para diferentes valores del parámetro conjugado  $\alpha_c$ .**

En la Fig. 26 a) se muestra el efecto de la variación del número de Sherwood a través de la longitud adimensional del microcanal, se evidencia que es al inicio del canal donde los mayores efectos del flujo convectivo se presentan en el proceso de tratamiento, pero a medida que se recorre la longitud del canal el transporte difusivo se vuelve más importante, esto se debe a que los efectos de la biorreacción son más fuertes por la desaparición de la especie  $i$  hasta que prácticamente son iguales y todo el proceso depende de la reacción superficial. Por otro lado, en la Fig. 26 b) se presenta el efecto de la variación del número de Sherwood utilizando el barrido del parámetro conjugado  $\alpha_c$ . Se demuestra que el transporte convectivo es importante sólo a la entrada del micro canal a medida que se avanza con respecto a  $\chi$  el transporte por difusión es el fenómeno relevante en todo el proceso.

## Capítulo 6

### 6. Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado numéricamente la reacción superficial de una biopelícula expuesta a una mezcla de gases circulando laminarmente en un microcanal y compuesto básicamente por sulfuro de hidrógeno y cualquier otra especie no reactiva, como puede ser el gas metano. Por Simplicidad, asumimos un flujo completamente desarrollado y luego el problema matemático se reduce para resolver dos ecuaciones de difusión: una para la región de gas y otra para la zona de biopelícula. De esta manera, se formuló el modelo matemático como un proceso de transferencia de masa conjugado. Usando un enfoque de capa límite convencional, el problema elíptico en la fase gaseosa, que está indicado por la presencia del término difusivo longitudinal de la Ecuación 30, se reduce a una formulación parabólica porque, para valores grandes de los números de Péclet, este término se puede eliminar. Luego, las ecuaciones de gobierno resultantes se resuelven numéricamente y se obtienen perfiles de concentración típicos para el sulfuro de hidrógeno en función de las variables adimensionales y algunos parámetros característicos como el número de Damköhler.

Este último parámetro ofrece nuevas perspectivas para estudiar el proceso reactivo: si bien se determinaron valores altos de este parámetro nos permiten obtener fácilmente una reducción significativa del sulfuro de hidrógeno en la base del soporte, el caso contrario para valores pequeños de este parámetro revela un comportamiento inestable. En nuestros ensayos numéricos, hemos obtenido un dominio para este parámetro para el cual  $15 \leq Da \leq 200$ . En este intervalo, las soluciones están bien definidas y se representan distribuciones de perfil clásicas en forma de "S".

Los resultados anteriores son una consecuencia directa de los valores asumidos del número de Damköhler: para valores crecientes, la actividad química en la superficie controlada por la ley de Monod es más robusta y el consumo de sulfuro de hidrógeno es más favorable. Debemos enfatizar que el orden de magnitud y los análisis numéricos confirman las conclusiones anteriores: los cambios más importantes en los perfiles de concentración ocurren para valores grandes de los números de Damköhler.

Diversos trabajos [65]–[67] demuestran que la relación entre los fenómenos de transporte de masa por convección, difusión y biorreacción, ellos están ligados por el espesor de las capas películas de fluido cercanas a la biopelícula, si el espesor es grande, las especies a tratar necesitan mayor cantidad de tiempo para difundirse hasta donde se encuentra la biopelícula. Y si, por el contrario, cuando se tiene capas de poco espesor el proceso es rápido. También se debe considerar que las diferentes capacidades de difusión de especies a tratar están determinadas por el tamaño molecular y medio en el cual se difunden, en este último se encuentra incluidas propiedades del medio como la viscosidad que puede acelerar o reducir drásticamente la velocidad de transporte

En este estudio preliminar no se incluyó el efecto de la reacción química dentro de la biopelícula, esto se debió al análisis sobre el parámetro conjugado  $\alpha_c$  y el  $Da_s$ , cuando se revisaron los resultados de la variación paramétrica se concluyó que la influencia de los valores de la difusión de especies en el seno del fluido y la biorreacción aportan la mayor parte del efecto en el transporte.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] G. S. Alemán-Nava *et al.*, “Renewable energy research progress in Mexico: A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 32, pp. 140–153, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.rser.2014.01.004.
- [2] D. Deublein and A. Steinhauser, *Biogas from waste and renewable resources: an introduction*. John Wiley & Sons, 2011.
- [3] J. G. Speight and K. Singh, *Environmental Management of Energy from Biofuels and Biofeedstocks*. Wiley, 2014.
- [4] L. Arellano *et al.*, *Purificación y usos del biogás*, 1st ed. Printed in Spain: Universitat Autònoma de Barcelona Servei de Publicacions, 2017.
- [5] F. Almenglo, “Desulfuración de biogás mediante un biofiltro percolador piloto con bacterias nitrato reductoras sulfoxidantes,” Universidad de Cadiz, España, 2014.
- [6] E. Ryckebosch, M. Drouillon, and H. Vervaeren, “Techniques for transformation of biogas to biomethane,” *Biomass and Bioenergy*, vol. 35, no. 5, pp. 1633–1645, May 2011, doi: 10.1016/j.biombioe.2011.02.033.
- [7] J. Nikiema, L. Bibeau, J. Lavoie, R. Brzezinski, J. Vigneux, and M. Heitz, “Biofiltration of methane: An experimental study,” *Chem. Eng. J.*, vol. 113, no. 2–3, pp. 111–117, Oct. 2005, doi: 10.1016/j.cej.2005.04.005.
- [8] N. Abatzoglou and U. De Sherbrooke, “A review of biogas purification,” 2009, pp. 42–71.
- [9] P. Weiland, “Biogas production: current state and perspectives,” *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, vol. 85, no. 4, pp. 849–60, Jan. 2010, doi: 10.1007/s00253-009-2246-7.
- [10] M. T. Varnero, M. Carú, K. Galleguillos, and P. Achondo, “Tecnologías disponibles para la Purificación de Biogás usado en la Generación Eléctrica,” *Inf. tecnológica*, vol. 23, no. 2, pp. 31–40, 2012, doi: 10.4067/S0718-07642012000200005.
- [11] S. Rasi, J. Lantelä, and J. Rintala, “Trace compounds affecting biogas energy utilisation – A review,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 52, no. 12, pp. 3369–3375, Nov. 2011, doi:



10.1016/j.enconman.2011.07.005.

- [12] G. M. Nisola *et al.*, “NH<sub>3</sub> gas absorption and bio-oxidation in a single bioscrubber system,” *Process Biochem.*, vol. 44, no. 2, pp. 161–167, Feb. 2009, doi: 10.1016/j.procbio.2008.10.004.
- [13] G. Baquerizo *et al.*, “A detailed model of a biofilter for ammonia removal: Model parameters analysis and model validation,” *Chem. Eng. J.*, vol. 113, no. 2–3, pp. 205–214, Oct. 2005, doi: 10.1016/j.cej.2005.03.003.
- [14] R. Singh and S. K. Mandal, “Microbial Removal of Hydrogen Sulfide from Biogas,” *Energy Sources, Part A Recover. Util. Environ. Eff.*, vol. 34, no. 4, pp. 306–315, Dec. 2011, doi: 10.1080/15567030903330686.
- [15] A. González-Sánchez, S. Revah, and M. a Deshusses, “Alkaline biofiltration of H<sub>2</sub>S odors,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 42, no. 19, pp. 7398–404, Oct. 2008.
- [16] M. Fortuny *et al.*, “Biological sweetening of energy gases mimics in biotrickling filters.,” *Chemosphere*, vol. 71, no. 1, pp. 10–7, Mar. 2008, doi: 10.1016/j.chemosphere.2007.10.072.
- [17] M. Ramírez, M. Fernández, C. Granada, S. Le Borgne, J. M. Gómez, and D. Cantero, “Biofiltration of reduced sulphur compounds and community analysis of sulphur-oxidizing bacteria,” *Bioresour. Technol.*, vol. 102, no. 5, pp. 4047–53, Mar. 2011, doi: 10.1016/j.biortech.2010.12.018.
- [18] A. Noyola, J. M. Morgan-Sagastume, and J. E. López-Hernández, “Treatment of Biogas Produced in Anaerobic Reactors for Domestic Wastewater: Odor Control and Energy/Resource Recovery,” *Rev. Environ. Sci. Bio/Technology*, vol. 5, no. 1, pp. 93–114, Feb. 2006, doi: 10.1007/s11157-005-2754-6.
- [19] S. a. Razzak, M. M. Hossain, R. a. Lucky, A. S. Bassi, and H. de Lasa, “Integrated CO<sub>2</sub> capture, wastewater treatment and biofuel production by microalgae culturing—A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 27, pp. 622–653, Nov. 2013, doi: 10.1016/j.rser.2013.05.063.
- [20] J. S. Devinny and J. Ramesh, “A phenomenological review of biofilter models,” *Chem.*

*Eng. J.*, vol. 113, no. 2–3, pp. 187–196, Oct. 2005, doi: 10.1016/j.cej.2005.03.005.

- [21] B. Halan, K. Buehler, and A. Schmid, “Biofilms as living catalysts in continuous chemical syntheses,” *Trends Biotechnol.*, vol. 30, no. 9, pp. 453–465, 2012, doi: 10.1016/j.tibtech.2012.05.003.
- [22] S. Kim and M. A. Deshusses, “Development and Experimental Validation of a Conceptual Model for Biotrickling Filtration of H<sub>2</sub>S,” *Environ. Prog.*, vol. 22, no. July, pp. 119–128, 2003.
- [23] J. S. Devinny, M. A. Deshusses, and T. S. Webster, *Biofiltration for air pollution control*. CRC press, 1998.
- [24] F. G. B. Zapata, “Fundamentos y casos exitosos de la biotecnología moderna.”
- [25] C. Picioreanu, M. C. M. van Loosdrecht, and J. J. Heijnen, “Multidimensional modeling of biofilm structure,” *Proc. 8th Int. Symp. Microb. Ecol.*, p. 254, 1999.
- [26] A. Bozorg, I. D. Gates, and A. Sen, “Impact of biofilm on bacterial transport and deposition in porous media,” *J. Contam. Hydrol.*, vol. 183, pp. 109–120, 2015, doi: 10.1016/j.jconhyd.2015.10.008.
- [27] H. Kanematsu and D. M. Barry, *Biofilm and Materials Science*. Springer, 2015.
- [28] Z. Shareefdeen and A. Singh, *Biotechnology for odor and air pollution control*. Springer Science & Business Media, 2005.
- [29] H. J. Eberl, *Mathematical modeling of biofilms*. 2006.
- [30] M.-C. Delhoménie and M. Heitz, “Biofiltration of air: a review.,” *Crit. Rev. Biotechnol.*, vol. 25, no. 1–2, pp. 53–72, 2005, doi: 10.1080/07388550590935814.
- [31] Q. Wang and T. Zhang, “Review of mathematical models for biofilms,” *Solid State Commun.*, vol. 150, no. 21–22, pp. 1009–1022, 2010, doi: 10.1016/j.ssc.2010.01.021.
- [32] P. Stoodley, D. DeBeer, and Z. Lewandowski, “Liquid flow in biofilm systems,” *Appl. Environ. Microbiol.*, vol. 60, no. 8, pp. 2711–2716, 1994.
- [33] Y. Shen *et al.*, “Role of biofilm roughness and hydrodynamic conditions in legionella pneumophila adhesion to and detachment from simulated drinking water biofilms,”

*Environ. Sci. Technol.*, vol. 49, no. 7, pp. 4274–4282, 2015, doi: 10.1021/es505842v.

- [34] J. I. Lee and A. E. Mather, “Solubility of Hydrogen Sulfide in Water.,” *Berichte der Bunsengesellschaft/Physical Chem. Chem. Phys.*, vol. 81, no. 10, pp. 1020–1023, 1977, doi: 10.1002/bbpc.19770811029.
- [35] E. L. Cussler, *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems*, 3rd ed. Cambridge University Press, 2009.
- [36] L. -S Fan, R. Leyva-Ramos, K. D. Wisecarver, and B. J. Zehner, “Diffusion of phenol through a biofilm grown on activated carbon particles in a draft-tube three-phase fluidized-bed bioreactor,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 35, no. 3, pp. 279–286, 1990, doi: 10.1002/bit.260350309.
- [37] H. Li, J. C. Crittenden, J. R. Mihelcic, and H. Hautakangas, “Optimization of Biofiltration for Odor Control: Model Development and Parameter Sensitivity,” *Water Environ. Res.*, vol. 74, no. 1, pp. 5–16, 2002.
- [38] X. Guimerà, A. D. Dorado, A. Bonsfills, G. Gabriel, D. Gabriel, and X. Gamisans, “Dynamic characterization of external and internal mass transport in heterotrophic biofilms from microsensors measurements,” *Water Res.*, vol. 102, pp. 551–560, 2016, doi: 10.1016/j.watres.2016.07.009.
- [39] X. Guimerà *et al.*, “Biofilm dynamics characterization using a novel DO-MEA sensor: mass transport and biokinetics,” *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, vol. 99, no. 1, pp. 55–66, 2015, doi: 10.1007/s00253-014-5821-5.
- [40] S. Kim and M. a. Deshusses, “Determination of mass transfer coefficients for packing materials used in biofilters and biotrickling filters for air pollution control—2: Development of mass transfer coefficients correlations,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 63, no. 4, pp. 856–861, Feb. 2008, doi: 10.1016/j.ces.2007.10.021.
- [41] S. Kim and M. a. Deshusses, “Determination of mass transfer coefficients for packing materials used in biofilters and biotrickling filters for air pollution control. 1. Experimental results,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 63, no. 4, pp. 841–855, Feb. 2008, doi: 10.1016/j.ces.2007.10.011.

- [42] R. F. Probstein, *Physicochemical hydrodynamics: an introduction*. John Wiley & Sons, 2005.
- [43] C. Z. Qin and S. M. Hassanizadeh, "Pore-Network Modeling of Solute Transport and Biofilm Growth in Porous Media," *Transp. Porous Media*, vol. 110, no. 3, pp. 345–367, 2015, doi: 10.1007/s11242-015-0546-1.
- [44] V. Lazarova and J. Manem, "Biofilm characterization and activity analysis in water and wastewater treatment," *Water Res.*, vol. 29, no. 10, pp. 2227–2245, 1995.
- [45] H. Horn and S. Lackner, "Modeling of Biofilm Systems: A Review," in *Advances in biochemical engineering/biotechnology*, vol. 14, no. August 2014, 2014, pp. 53–76.
- [46] B. E. Rittmann, L. Crawford, C. K. Tuck, and E. Namkung, "In situ determination of kinetic parameters for biofilms: Isolation and characterization of oligotrophic biofilms.," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 28, no. 11, pp. 1753–60, Nov. 1986, doi: 10.1002/bit.260281120.
- [47] J. Monod, "a Certain Number," *Annu. Rev. M*, vol. 3, no. XI, pp. 371–394, 1949.
- [48] A. A. Esener, J. A. Roels, and N. W. F. Kossen, "Theory and applications of unstructured growth models: Kinetic and energetic aspects," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 25, no. 12, pp. 2803–2841, 1983, doi: 10.1002/bit.260251202.
- [49] I. J. Dunn, E. Heinzle, J. Ingham, and J. E. Přenosil, "Biological Reaction Engineering," *Biological Reaction Engineering*. 2003, doi: 10.1002/3527603050.
- [50] A. G. Fredrickson, "Formulation of Structured Growth Models," *Biotechnol. Bioeng.*, vol. XVIII, pp. 1481–1486, 1976, doi: 10.1002/bit.260080313.
- [51] A. Bouguettoucha and A. Amrane, "Unstructured Models for Lactic Acid Fermentation – A Review," vol. 49, no. 1, pp. 3–12, 2011.
- [52] N. Luna, F. Méndez, and C. Trevio, "Conjugated heat transfer in circular ducts with a power-law laminar convection fluid flow," *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 45, no. 3, pp. 655–666, 2001, doi: 10.1016/S0017-9310(01)00147-8.
- [53] O. Bautista and F. Méndez, "Internal heat generation in a discrete heat source:

Conjugate heat transfer analysis,” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 26, no. 17–18, pp. 2201–2208, 2006, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2006.03.018.

- [54] F. Méndez and C. Treviño, “The conjugate conduction-natural convection heat transfer along a thin vertical plate with non-uniform internal heat generation,” *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 43, no. 15, pp. 2739–2748, 2000, doi: 10.1016/S0017-9310(99)00331-2.
- [55] C. Picioreanu, J. B. Xavier, and M. C. M. van Loosdrecht, “Advances in mathematical modeling of biofilm structure,” *Biofilms*, vol. 1, no. 4, pp. 337–349, 2004, doi: 10.1017/S1479050505001572.
- [56] A. Bejan, *Convection heat transfer*. John Wiley & Sons, 2013.
- [57] A. Tamimi, E. B. Rinker, and O. C. Sandall, “Diffusion Coefficients for Hydrogen Sulfide, Carbon Dioxide, and Nitrous Oxide in Water over the Temperature Range 293–368 K,” *J. Chem. Eng. data*, vol. 39, pp. 330–332, 1994.
- [58] Robert I. Mott and Joseph A. Untener, *Mecánica de Fluidos*. Pearson, 2015.
- [59] A. M. Montebello *et al.*, “Simultaneous methylmercaptan and hydrogen sulfide removal in the desulfurization of biogas in aerobic and anoxic biotrickling filters,” *Chem. Eng. J.*, vol. 200–202, pp. 237–246, Aug. 2012, doi: 10.1016/j.cej.2012.06.043.
- [60] M. Ramírez, J. M. Gómez, G. Aroca, and D. Cantero, “Removal of hydrogen sulfide by immobilized *Thiobacillus thioparus* in a biotrickling filter packed with polyurethane foam,” *Bioresour. Technol.*, vol. 100, no. 21, pp. 4989–95, Nov. 2009, doi: 10.1016/j.biortech.2009.05.022.
- [61] W. Ahmed, Z. M. Shareefdeen, and N. A. Jabbar, “Dynamic modeling and analysis of biotrickling filters in continuous operation for H<sub>2</sub>S removal,” *Clean Technol. Environ. Policy*, Dec. 2013, doi: 10.1007/s10098-013-0697-0.
- [62] X.-H. Zhou, Y.-Q. Qiu, H.-C. Shi, T. Yu, M. He, and Q. Cai, “A new approach to quantify spatial distribution of biofilm kinetic parameters by in situ determination of oxygen uptake rate (OUR),” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 43, no. 3, pp. 757–63, Feb. 2009.
- [63] C. Picioreanu, M. C. M. Van Loosdrecht, and J. J. Heijnen, “Effect of diffusive and convective substrate transport on biofilm structure formation: A two-dimensional

modeling study,” *Biotechnol. Bioeng.*, vol. 69, no. 5, pp. 504–515, 2000, doi: 10.1002/1097-0290(20000905)69:5<504::AID-BIT5>3.0.CO;2-S.

- [64] C. Picioreanu, M. C. van Loosdrecht, and J. J. Heijnen, “A theoretical study on the effect of surface roughness on mass transport and transformation in biofilms,” *Biotechnol Bioeng*, vol. 68, no. 4, pp. 355–369, 2000.
- [65] H. Li, F. Yi, X. Li, and X. Gao, “Numerical modeling of mass transfer processes coupling with reaction for the design of the ozone oxidation treatment of wastewater,” *Front. Chem. Sci. Eng.*, 2020, doi: 10.1007/s11705-020-1963-4.
- [66] S. Zhu and S. Chen, “Impacts of Reynolds number on nitrification biofilm kinetics,” *Aquac. Eng.*, vol. 24, no. 3, pp. 213–229, 2001, doi: 10.1016/S0144-8609(00)00071-6.
- [67] M. G. Parvatiyar, R. Govind, and D. F. Bishop, “Biodegradation of toluene in a membrane biofilter,” *J. Memb. Sci.*, vol. 119, no. 1, pp. 17–24, 1996, doi: 10.1016/0376-7388(96)00021-X.