



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

00579
7
24

FACULTAD DE QUIMICA

"DESCRIPCION ESTOCASTICA DE
BIOPELICULAS EN FILTROS
PERCOLADORES"

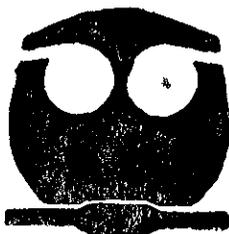
T E S I S

PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRIA EN INGENIERIA QUIMICA
(PROCESOS)

P R E S E N T A:

ELENA FRANCISCA IZQUIERDO KULICH



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

MEXICO, D. F.

262463

1998



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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 DESIGNADO

PRESIDENTE: Dr. Octavio Manero Brito.

PRIMER VOCAL: Dra. Carmen Durán de Bazúa.

SECRETARIO: Dr. Luis Vicente Hinestroza.

PRIMER SUPLENTE: Dr. Alfonso Durán Moreno.

SEGUNDO SUPLENTE: Dr. Javier Audry Sánchez.

LUGAR DONDE SE
DESARROLLÓ LA TESIS: U.N.A.M.- Facultad de
Química e Instituto de Física.

ASESOR DE TESIS: Dr. Rosalío Rodríguez Zepeda.
(U.N.A.M.)

SUSTENTANTE: Ing. Elena Francisca Izquierdo Kulich.
(I.S.P.J.A.E.,
CIUDAD DE LA
HABANA, CUBA)

Índice

| | |
|---|----|
| 1. Introducción | 1 |
| 2. Filtros percoladores y biopelículas | 6 |
| 2.1. Características de los filtros percoladores | 6 |
| 2.1.1. Principio de funcionamiento | 6 |
| 2.1.2. Características de operación | 7 |
| 2.1.3. Enfoque tradicional en el estudio y operación de los filtros percoladores | 8 |
| 2.1.4. Enfoque moderno en el estudio y modelación de los filtros percoladores | 9 |
| 2.1.5. Necesidad de un nuevo enfoque en el estudio y la modelación de los filtros percoladores | 10 |
| 2.2. Características fundamentales de las biopelículas | 10 |
| 2.2.1. Estructura interna | 11 |
| 2.2.2. Composición química y biológica | 11 |
| 2.2.3. Evolución temporal | 12 |
| 2.2.4. Transferencia de masa y consumo de sustrato | 13 |
| 2.2.5. Necesidad de un nuevo enfoque en el estudio y modelación de las biopelículas | 14 |
| 3. Métodos de modelación estocástica | 16 |
| 3.1. Descripción mesoscópica | 17 |
| 3.2. Elementos de la teoría de procesos estocásticos | 18 |
| 3.2.1. Variable aleatoria y proceso estocástico | 18 |
| 3.2.2. Procesos de Markov | 20 |
| 3.2.3. Procesos estocásticos de un paso | 20 |
| 3.2.4. Ecuación Maestra | 21 |
| 3.2.5. Métodos de solución de la Ecuación Maestra | 23 |
| 4. Descripción estocástica de biopelículas | 27 |
| 4.1. Consideraciones generales | 27 |
| 4.2. Caso I: Biopelícula uniespecie sin erosión | 28 |
| 4.2.1. Definición de los eventos elementales | 28 |
| 4.2.2. Obtención de la Ecuación Maestra | 29 |
| 4.2.3. Solución de la Ecuación Maestra | 29 |
| 4.3. Caso II: Biopelícula uniespecie con erosión | 34 |
| 4.3.1. Definición de los eventos elementales | 34 |

| | |
|---|----|
| 4.3.2. Obtención de la Ecuación Maestra | 35 |
| 4.3.3. Solución de la Ecuación Maestra | 36 |
| 4.4. Caso III: Biopelícula multiespecie | 40 |
| 4.4.1. Definición de los eventos elementales | 40 |
| 4.4.2. Obtención de la Ecuación Maestra | 42 |
| 4.4.3. Solución de la Ecuación Maestra | 44 |
| 5. Teoría vs. experimento | 47 |
| 5.1. Introducción | 47 |
| 5.2. Teoría vs. los datos obtenidos por Murga y colaboradores..... | 48 |
| 5.2.1. Procedimiento experimental | 48 |
| 5.2.2. Modelos empleados | 49 |
| 5.2.3. Resultados de la comparación | 50 |
| 5.3. Teoría vs. los datos obtenidos por Peyton | 51 |
| 5.3.1. Procedimiento experimental | 51 |
| 5.3.2. Modelos empleados | 52 |
| 5.3.3. Resultados de la comparación | 53 |
| 5.4. Estocástico vs. determinista | 54 |
| 5.5. Alcance y limitaciones de los modelos | 54 |
| | |
| 6. Influencia de las fluctuaciones temporales de la biopelícula en la operación de los filtros percoladores | 57 |
| 6.1. Operación en estado estacionario | 57 |
| 6.1.1. Consideraciones | 57 |
| 6.1.2. Modelo determinista de biopelícula | 58 |
| 6.1.3. Modelo determinista para la remoción de sustrato en la biopelícula | 59 |
| 6.1.4. Modelación determinista del filtro percolador | 60 |
| 6.1.5. Modelo estocástico del filtro percolador | 60 |
| 6.1.6. Análisis cuantitativo de la influencia de las fluctuaciones | 62 |
| 6.2. Operación de "puesta en marcha" | 64 |
| | |
| Conclusiones y perspectivas | 66 |
| | |
| Anexos | |
| Anexo A. Comportamiento operacional del filtro percolador de la planta de tratamiento de aguas residuales de la UNAM | 71 |
| A.1. Características generales de la planta..... | 71 |
| A.2. Datos de operación del filtro percolador establecidos por diseño | 72 |
| A.3. Datos históricos de operación del filtro percolador | 72 |
| A.4. Análisis del comportamiento histórico de operación | 73 |
| | |
| Anexo B. Modelos tradicionales de filtros percoladores | 75 |

| | |
|--|-----------|
| Anexo C. Modelos actuales de filtros percoladores | 77 |
| C.1. Modelos relacionados con la teoría de la biopelícula | 77 |
| C.1.1. Modelo de Rittmann | 77 |
| C.1.2. Modelo de Bryers | 77 |
| C.1.3. Modelo de Wanner y Güjer | 78 |
| C.1.4. Modelo de Wanner y Cunningham | 78 |
| C.2. Modelos relacionados con el desprendimiento de biomasa | 79 |
| C.2.1. Modelo de Rittmann | 79 |
| C.2.2. Modelo de Wanner y Güjer | 79 |
| C.2.3. Modelo de Stewart | 80 |
| C.3. Modelos relacionados con la remoción de sustrato | 80 |
| | |
| Anexo D. Métodos experimentales desarrollados para el estudio de las biopelículas | 83 |
| | |
| Bibliografía | 85 |

Agradecimientos

Deseo expresar mi más grande y sincero agradecimiento al Dr. Rosalío Rodríguez Zepeda, que con infinita paciencia dedicó interminables horas de su valioso tiempo para enseñarme los principios y conceptos relacionados con la modelación estocástica que se aplican en este trabajo. Estoy segura que si no fuera por él, me hubiese sido imposible o extraordinariamente difícil confeccionar esta tesis. Quiero dar las gracias expresamente a la Dra. Carmen Durán de Bazúa, que siempre estuvo dispuesta a ayudarme y a colaborar en todo lo necesario para la realización de este trabajo, y de quien aprendí muchas cosas útiles e interesantes en el campo de la ingeniería ambiental. Expreso también mi sincero agradecimiento al Ing. Juan Hilario García Gil, superintendente de la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales de Ciudad Universitaria, por su valiosa cooperación durante la obtención de los datos históricos de operación del filtro percolador de la planta. Deseo también dar las gracias a todos los profesores de la Facultad de Química de la UNAM por todas las cosas que me enseñaron en las materias básicas que cursé durante la maestría en Ingeniería de Procesos, que culmina con el presente trabajo. Agradezco a mi país por permitirme estudiar esta maestría, y a mis compatriotas que en estos momentos, lejos de aquí, realizan mi trabajo en Cuba para que yo pueda estar en México. Quiero también agradecer a mi padre la educación me dio y los principios que me inculcó. Agradezco infinitamente a la Universidad Nacional Autónoma de México por haberme dado la oportunidad de estudiar en esta magnífica escuela y conocer este interesante, exótico y precioso país que es México. Para mí, haber tenido esta oportunidad ha significado una increíble e inolvidable experiencia que recordaré durante mucho tiempo. Quiero también expresar mi más sincero agradecimiento al pueblo mexicano por su cálido recibimiento y acogida, y especialmente a la Sra. Carmen Esponda, quien ha sido como una madre para mí y en cuya casa viví durante mi estancia en este país. Aunque yo regreso a Cuba, llevaré en mi corazón el recuerdo de este maravilloso país. Deseo a todo el pueblo de México mucha paz y prosperidad para los tiempos venideros. Muchas gracias.

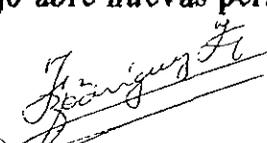
Elena F. Izquierdo Kulich.

RESUMEN

Los filtros percoladores constituyen uno de los equipos que se emplean con mayor frecuencia para la depuración de aguas residuales. Su principio de funcionamiento se basa en la remoción de los contaminantes biodegradables presentes en el agua residual por una comunidad de microorganismos que se desarrolla adherida a la superficie del empaque, denominada biopelícula o limo. Las biopelículas se caracterizan porque su espesor no presenta un valor fijo y determinista a un tiempo dado, sino que éste tiende a fluctuar alrededor de un valor promedio o esperado, confiriéndole un determinado carácter rugoso a la superficie de la biomasa. A pesar de que esta rugosidad puede afectar el régimen hidrodinámico del flujo, así como la eficiencia de operación de los filtros percoladores, la misma no puede ser modelada empleando las técnicas de modelación deterministas.

En el presente trabajo se describe a un nivel mesoscópico la evolución temporal del limo considerando tres casos fundamentales: biopelícula uniespecie sin desprendimiento, biopelícula uniespecie con erosión y biopelícula multiespecie con erosión. Los modelos estocásticos que se obtienen permiten describir no sólo el comportamiento del valor esperado del espesor con respecto al tiempo, sino también las fluctuaciones internas temporales que se producen alrededor de este valor producto de los procesos de reproducción y desprendimiento de biomasa que ocurren a nivel de cada microorganismo individual. De esta forma, es posible predecir la rugosidad del limo y analizar su influencia en la operación de los filtros percoladores. El estudio de este último aspecto mostró que estas fluctuaciones no influyen prácticamente en la operación en estado estacionario de los filtros, pero pueden afectar la fase de puesta en marcha de estos equipos y generar inestabilidades que incrementen su duración.

Los resultados teóricos fueron comparados con los resultados experimentales reportados en la literatura consultada, encontrándose que para algunos casos los errores detectados fueron menores a un 10%, mientras que en otros fueron mayores a un 50%. Esto señala el carácter aproximado de los modelos obtenidos, resultado de las consideraciones que se establecieron durante su obtención. Sin embargo, algunas de sus limitaciones pueden ser superadas en el futuro, por lo que el presente trabajo abre nuevas perspectivas al respecto.


Dr. Rosalío F. Rodríguez Zepeda

1. Introducción

El aumento de la densidad de población a nivel mundial, junto con el drástico incremento de la producción industrial, resultado del desarrollo tecnológico sin precedentes que tiene lugar en la actualidad, ha acarreado que el tratamiento de aguas residuales industriales y domésticas constituya uno de los problemas más importantes a resolver con vistas a disminuir el constante deterioro del medio ambiente.

Desde el punto de vista tecnológico, el tratamiento de aguas residuales comenzó a sistematizarse a principios de siglo, cuando la mayor parte de estas aguas eran domésticas, por lo que su depuración se llevaba a cabo fundamentalmente por medio de procesos biológicos, basados en el uso de microorganismos que utilizan como sustrato las sustancias biodegradables presentes en el agua residual. Sin embargo, el aumento de la generación de aguas residuales industriales no adecuadas para este tipo de tratamiento ha conllevado el empleo adicional de procesos físico-químicos para su depuración.

Los **filtros percoladores** constituyen uno de los primeros equipos utilizados para el tratamiento biológico de aguas residuales (Figura 1). A pesar de su antigüedad, su alta eficiencia y relativo bajo costo de operación hacen que sean empleados frecuentemente en la actualidad. Desde el punto de vista moderno, se definen como *reactores biotecnológicos aerobios y/o facultativos, con sustrato múltiple y cultivo mixto* y, dentro de este contexto, se clasifican como *reactores de biopelícula*, ya que la comunidad de microorganismos se desarrolla en forma de película adherida a una superficie sólida. Aunque en un principio fueron destinados a la depuración de aguas residuales domésticas, se utilizan para tratar aguas residuales de origen industrial cuando las mismas son biodegradables, no presenten sustancias tóxicas para los microorganismos y sus características físico-químicas sean adecuadas para el crecimiento y reproducción de éstos.

Al diseñar y operar un filtro percolador, el aspecto más importante a tomar en cuenta es que *la concentración de contaminantes a la salida no exceda el valor máximo permisible* de acuerdo al uso posterior del agua tratada y la legislación vigente relacionada con la conservación del medio ambiente. Sin embargo, a pesar de su alta eficiencia en general, la concentración de sustrato en el efluente presenta una marcada variabilidad en el tiempo que hace que se sobrepase con cierta frecuencia el valor máximo permitido, lo que obviamente afecta la calidad de operación y la confiabilidad del sistema.

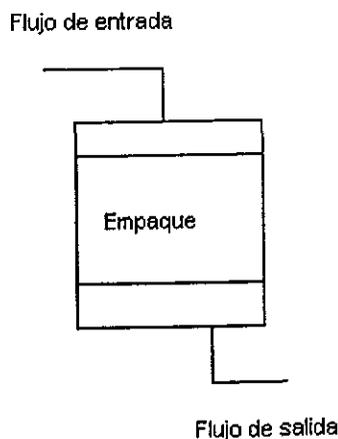


Figura 1. Filtro percolador

Las causas de esta variabilidad temporal se atribuyen a diversos factores, entre los que se pueden señalar: i) *las fluctuaciones temporales que se presentan en la temperatura, concentración y composición del agua residual de entrada*, ii) *cambios en las condiciones ambientales que afectan a la comunidad de microorganismos*, iii) *la distribución no uniforme del agua residual sobre la superficie del empaque*, provocada casi siempre por establecer inadecuadamente las condiciones de operación y iv) *las fluctuaciones temporales y espaciales del espesor de la biopelícula*. Los factores i) y ii) son resultado de la propia naturaleza de todos los procesos biológicos de tratamiento de aguas residuales, mientras que las fluctuaciones que se presentan en el espesor de la biopelícula son producidas por procesos internos y externos que tienen lugar específicamente en ésta.

Las **fluctuaciones temporales y/o espaciales** se definen como *la diferencia entre el valor real que toma una variable y su valor promedio temporal y/o espacial*. En el caso del espesor de la biopelícula, éstas no sólo generan fluctuaciones espaciales y temporales en la remoción de sustrato, sino que afectan negativamente la distribución del agua residual y pueden manifestarse en el crecimiento excesivo de la biomasa en determinadas zonas del empaque, incrementándose los riesgos de obstrucción de ésta. Todo lo anterior, en general, afecta la eficiencia del sistema y provoca la aparición de problemas operativos.

A pesar de estos efectos, los modelos deterministas de biopelícula que se reportan en la bibliografía consultada son incapaces de modelarlas y predecir su influencia en la operación de los filtros percoladores, lo que constituye una de sus más señaladas limitaciones. Esto se debe a que la propia naturaleza de estas fluctuaciones impide que puedan ser representadas como funciones analíticas desarrollables en serie de Taylor. Por otra parte, al adoptar este punto de vista no se

toman en cuenta explícitamente los fenómenos microscópicos que ocurren a nivel de cada microorganismo individual, y que se manifiestan precisamente a través de esta variabilidad. Tampoco el punto de vista estadístico resulta adecuado para predecirlas, ya que usualmente no considera el tiempo como variable independiente y se basa en suponer que las fluctuaciones temporales que se producen en las variables que describen al sistema bajo estudio son siempre despreciables.

Por estas razones, *en el presente trabajo se propone describir el comportamiento temporal de las biopelículas desde un punto de vista mesoscópico*. Esta descripción permite predecir, tanto el comportamiento determinista del espesor de la biopelícula, como la influencia de los fenómenos que tienen lugar a nivel de cada microorganismo individual -es decir, a nivel microscópico- que no son tomados en cuenta explícitamente en la descripción macroscópica. Por esta razón constituye un punto intermedio entre la descripción macroscópica y la microscópica, y una descripción más amplia que la determinista.

La idea fundamental en que se basa este punto de vista consiste en tomar en cuenta que las fluctuaciones del espesor constituyen una manifestación de la presencia de un enorme número de grados de libertad microscópicos que afectan el comportamiento macroscópico de la biopelícula. En este caso se considera que los fenómenos internos de reproducción y desprendimiento de la biomasa, producidos a nivel de cada microorganismo individual, pueden ser representados como *procesos estocásticos*. El punto de partida para implementar esta descripción consiste en identificar al espesor de biopelícula con una *función o variable estocástica*, en vez de con una variable determinista.

Es importante señalar que *los modelos estocásticos propuestos en este trabajo sólo toman en cuenta las fluctuaciones internas temporales que se producen en el espesor producto de los fenómenos internos de reproducción de los microorganismos y desprendimiento de biomasa debido a la erosión provocada por el esfuerzo de corte del fluido*. Estos modelos resultan inadecuados para describir las fluctuaciones internas espaciales, que al considerar que la posición espacial es una variable aleatoria requieren la introducción de un número infinito de variables estocásticas para describir la biopelícula. Tampoco resultan adecuados para modelar las fluctuaciones externas que se producen como resultado de la naturaleza intrínsecamente aleatoria de las condiciones en las que tiene lugar el desarrollo de las biopelículas, ya que los parámetros externos que representan estas condiciones se identificaron con variables deterministas.

La metodología a seguir para implementar esta descripción consiste en la realización de las siguientes etapas y objetivos:

- 1.- Definición de los eventos internos que tienen lugar en las biopelículas.
- 2.- Obtención de la Ecuación Maestra a partir de los eventos definidos.
- 3.- Solución de la Ecuación Maestra para poder describir la evolución temporal de las fluctuaciones internas temporales asociadas al comportamiento del espesor de biomasa.

4.- Comparación de los resultados predichos por los modelos estocásticos con los resultados experimentales reportados en la literatura consultada.

5.- Predicción de la influencia de las fluctuaciones internas temporales de la biopelícula en el comportamiento operativo de los filtros percoladores.

6.- Análisis del alcance y las limitaciones de los modelos obtenidos.

Al respecto fueron obtenidos tres tipos de modelos fundamentales, los que corresponden a tres casos específicos: **Caso I:** *biopelícula uniespecie, sin desprendimiento de biomasa*, **Caso II:** *biopelícula uniespecie, con desprendimiento de biomasa debido al esfuerzo de corte del fluido* y **Caso III:** *biopelícula multi-especie, con y sin interacciones entre las especies, y desprendimiento de biomasa debido al esfuerzo de corte del fluido*.

Los modelos estocásticos propuestos tienen la gran ventaja de que, al ser capaces de describir las fluctuaciones temporales internas que se producen alrededor del valor esperado del espesor de la biopelícula, permiten estimar bajo qué condiciones estas fluctuaciones pueden jugar un papel importante en la operación de los filtros percoladores, lo que no puede predecirse cuando se emplean las técnicas deterministas y estadísticas en la modelación de estos sistemas. De esta forma, superan una de las limitaciones más señaladas de los modelos actuales.

No obstante, como todos los modelos matemáticos, éstos presentan un conjunto de limitaciones debido a las consideraciones que se establecen durante su formulación. Estas consideraciones son necesarias e inevitables, y son el resultado de buscar un equilibrio entre la complejidad matemática y la concordancia con los experimentos. Es de poca utilidad práctica tener un modelo que representa muy bien los procesos reales, pero imposible de resolver con las herramientas matemáticas disponibles, como tener un modelo muy simple pero poco representativo de los fenómenos que tienen lugar. Además se debe tomar en cuenta que la modelación matemática no pretende constituir una representación exacta de la realidad, sino un modo de predecir aproximadamente el comportamiento de los fenómenos y estudiar cuáles son los factores más importantes que influyen sobre éstos.

Este trabajo ha sido estructurado en seis capítulos. En el segundo capítulo se exponen las características fundamentales de los filtros percoladores y de los modelos matemáticos que se emplean comúnmente para diseñarlos y describir su operación. Se describen, además, las propiedades más importantes de las biopelículas, que constituyen la base de su principio de operación y funcionamiento.

En el capítulo tercero se exponen los conceptos fundamentales necesarios para construir una descripción de los fenómenos que ocurren en la biopelícula desde el punto de vista mesoscópico y estocástico, y se introducen las herramientas matemáticas que se utilizarán posteriormente en este trabajo.

En el capítulo cuarto se presentan las hipótesis y consideraciones subyacentes en la formulación de los modelos estocásticos propuestos. Tal y como se verá en este capítulo, *existen situaciones en las que los modelos predicen que las fluctua-*

ciones internas temporales del espesor de biopelícula son grandes, influyendo en la evolución temporal de ésta, por lo que las mismas no sólo no se deben despreciar, sino que deben tomarse en cuenta por las afectaciones que ocasionan en los procesos relacionados con biopelículas.

En el capítulo quinto se comparan cualitativa y cuantitativamente los resultados predichos teóricamente con los resultados experimentales reportados en la literatura consultada, con vistas a establecer las limitaciones y el alcance de los modelos obtenidos. Tal y como se verá en este capítulo, al realizar la comparación cuantitativa se pudo observar que para algunas situaciones los errores obtenidos fueron menores a un 10%, lo que indica una predicción muy aceptable, aunque en otras, sin embargo, los errores fueron mayores a un 50%, lo que constituye una predicción inadecuada. Estos errores se deben a las consideraciones que se establecen al obtener los modelos que se presentan en el capítulo 3.

En el capítulo sexto se emplean los modelos estocásticos propuestos para analizar la influencia de las fluctuaciones internas temporales del espesor de biopelícula en el comportamiento operativo de los filtros percoladores y establecer bajo que condiciones las mismas juegan un papel importante. Este análisis sugiere que las fluctuaciones temporales internas del espesor de biopelícula pueden afectar el comportamiento de la fase de puesta en marcha de estos equipos, provocando la aparición de inestabilidades que incrementen el tiempo necesario para alcanzar el estado estable de operación, con las consiguientes pérdidas económicas que esto implica. El análisis realizado también sugiere la necesidad de considerar la influencia de las fluctuaciones externas del espesor de la biopelícula en la operación estable de estos equipos. De esta forma, el trabajo presente no sólo emplea un nuevo punto de vista en la modelación de estos sistemas, sino que abre nuevas perspectivas de investigación futura.

Se presentan además un conjunto de anexos en los que se exponen con detalle algunos aspectos que se espera contribuyan a enriquecer los temas expuestos en el texto principal.

2. Filtros percoladores y biopelículas

2.1. Características de los filtros percoladores

Los filtros percoladores constituyen ejemplos típicos de reactores biotecnológicos de lecho empacado [1]. A diferencia de otros procesos del mismo tipo, el objetivo de los mismos no es la producción de una sustancia específica o tipo de microorganismo, sino la remoción de sustrato y, bajo este concepto se utilizan para la depuración de aguas residuales [2].

2.1.1. Principio de funcionamiento

De manera general, los filtros percoladores están constituidos por un tanque relleno de piedras u otro tipo de material, sintético o natural, a través del cual percola el agua residual. Ésta es alimentada de forma intermitente, lo que garantiza la presencia del oxígeno necesario para que predominen los procesos biológicos de tipo aerobio. La ventilación a estos sistemas se realiza generalmente de forma natural, aunque en algunos casos se emplea la ventilación forzada [1].

En la superficie del relleno o empaque se desarrolla un cultivo mixto de microorganismos denominado **biopelícula**. Estos microorganismos emplean como fuente de energía y alimento para crecer y reproducirse los contaminantes biodegradables presentes en el agua residual. De esta forma se garantiza que el agua sea parcialmente descontaminada a medida que percola a través del empaque.

Al igual que otros procesos de tratamiento biológico [1], el uso exitoso de estos sistemas depende en gran medida del tipo de agua residual a tratar y su grado de biodegradabilidad. Sin embargo, presenta algunas ventajas en comparación con los procesos de biomasa suspendida, entre las que se pueden señalar una mayor resistencia de la comunidad de microorganismos ante la presencia esporádica de sustancias tóxicas [3], una operación más estable y el no requerir de la separación y recirculación de la biomasa.

Además de la remoción de sustrato, en estos sistemas se produce el desprendimiento continuo de parte de la biopelícula [4], por lo que en el efluente usualmente existe una determinada concentración de biomasa suspendida. Ésta es eliminada mediante el empleo de sedimentadores secundarios [5], garantizándose de esta manera que el agua tratada cumpla con las características requeridas

de acuerdo con la legislación vigente relacionada con la conservación del medio ambiente.

Por otra parte, con el objetivo de lograr una repartición uniforme del agua residual y del sustrato sobre la superficie del empaque, así como disminuir la acumulación de biomasa, generalmente se recircula una parte del efluente [1].

2.1.2. Características de operación

Desde el punto de vista ingenieril, la operación de los filtros percoladores se describe a través de un conjunto relativamente pequeño de variables [6], las que por conveniencia se pueden clasificar como variables de diseño, de operación y de estado. Las **variables de diseño** comprenden la *profundidad* del filtro, el *diámetro* de la sección transversal y el área superficial del empaque por unidad de volumen de ésta, conocida comúnmente como *área superficial específica*. Las **variables de operación**, a su vez, se clasifican como **variables de entrada** -concentración, composición y flujo del influente, así como el *flujo recirculado*-, y como **variables de salida** -concentración, composición y flujo del efluente-. La **variable de estado** característica de los filtros percoladores es la cantidad de biomasa acumulada o *espesor de biopelícula*. Por otra parte, la *eficiencia* de operación se mide con base en la fracción de sustrato removido con respecto a la cantidad total de sustrato de entrada.

Todas estas variables se encuentran interrelacionadas entre sí de forma bastante complicada. Sin embargo, las observaciones experimentales han permitido constatar los siguientes hechos generales: i) *la eficiencia de operación se favorece con el aumento de la profundidad del filtro y el área superficial del empaque* [7], ii) *el aumento de la concentración de sustrato a la entrada incrementa la cantidad total de sustrato removido, pero disminuye la eficiencia de operación y aumenta el espesor de biopelícula y la concentración de sustrato y biomasa suspendida en el efluente* [1], iii) *el aumento del flujo de agua residual disminuye la cantidad de sustrato removido, pero garantiza una distribución uniforme del agua sobre la superficie del empaque y disminuye la acumulación de biomasa* [7], iv) *un incremento excesivo en el espesor de biopelícula provoca un predominio del mecanismo de remoción anaerobio, con la consiguiente disminución de la eficiencia y la aparición de malos olores, e incrementa los riesgos de obstrucción del empaque* y v) *el espesor de la biopelícula disminuye con la profundidad, y a una misma profundidad, presenta una variabilidad espacial y temporal que puede afectar el patrón hidrodinámico del flujo y la remoción de sustrato, con su correspondiente afectación a la eficiencia global del sistema* [1].

Los filtros percoladores se caracterizan por presentar una alta eficiencia, usualmente calculada entre un setenta y un noventa por ciento, siempre que las variables de operación sean correctamente establecidas y el agua residual tenga un grado de biodegradabilidad adecuado para ser depurada mediante tratamiento biológico

y no presente sustancias tóxicas para los microorganismos [3]. No obstante, en algunas ocasiones se presentan un conjunto de problemas operativos que afectan la eficiencia, tales como la obstrucción del empaque [8], una repartición inadecuada del líquido sobre la superficie del relleno y el predominio de los procesos anaerobios.

Otra de las características más señaladas es la marcada variabilidad temporal de la concentración de sustrato en el efluente que provoca que, en determinados momentos, se sobrepase el valor máximo permitido, lo que evidentemente afecta la confiabilidad y la eficiencia de operación [9]. Para ejemplificar este fenómeno en el **Anexo A** se presentan los datos históricos de operación del filtro percolador de la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales de la Ciudad Universitaria de la UNAM, en México D. F.

2.1.3. Enfoque tradicional en el estudio y modelación de los filtros percoladores

El estudio de los filtros percoladores está indisolublemente unido a la búsqueda de modelos matemáticos que permitan establecer el valor de las variables de diseño para cumplir los requerimientos de operación establecidos, así como predecir su comportamiento bajo diferentes condiciones de trabajo.

Los ingenieros civiles fueron los que primero se dedicaron a estudiar los filtros percoladores, por lo que los modelos que empleaban para su diseño tienen una base fuertemente empírica y estadística. En este trabajo éstos han sido clasificados como **modelos tradicionales**, destacándose que, a pesar de su antigüedad y limitaciones, aún son empleados con cierto éxito por los diseñadores y operadores de procesos. De acuerdo al punto de vista adoptado para su obtención, los mismos se pueden dividir en:

i) **modelos estadísticos**: la relación entre las variables de operación y diseño se establece empleando técnicas de modelación estadísticas basadas en la regresión lineal y no lineal [10]-[12].

ii) **modelos de primer orden**: se basan en la observación experimental de que existe una dependencia de primer orden entre la profundidad del empaque y la eficiencia [13, 14].

iii) **modelos que toman en cuenta la biomasa**: constituyen los primeros intentos de tratar de tomar en cuenta las ecuaciones cinéticas relativas a la remoción de sustrato por los microorganismos en la modelación de estos sistemas. No obstante, su aplicación inicial conllevó al establecimiento de un conjunto de consideraciones que le convierten en modelos típicos de primer orden [15].

Este enfoque en la modelación casi siempre requiere del ajuste experimental de parámetros, lo que presupone la construcción previa del filtro o de plantas pilotos [16]. Esto es poco práctico para el diseño y constituye una de las razones por las que en determinadas ocasiones la operación real no corresponde con la prevista,

ya que se extrapolan datos que no son equivalentes ni responden al caso concreto de que se trata. Por otra parte, no establecen criterios unificados de diseño, ya que su base empírica hace que el criterio a seleccionar dependa del modelo escogido y la experiencia del diseñador e, inclusive, se puede presentar el caso de que cada uno arroje un resultado diferente para una misma situación [1, 17, 18].

Adicionalmente, no predicen el espesor de biopelícula ni su influencia directa en la eficiencia. También son inadecuados para describir la variabilidad temporal de la concentración de sustrato de salida, debido a que **los métodos estadísticos se basan en considerar despreciables las fluctuaciones temporales que se producen alrededor del valor esperado de las variables que describen el comportamiento del sistema bajo estudio, de ahí su incapacidad para predecir éstas.**

En el **Anexo B** se presentan algunos de los modelos tradicionales típicos que se emplean comúnmente para diseño y predicción del comportamiento operativo de los filtros percoladores.

2.1.4. Enfoque moderno en el estudio y modelación de los filtros percoladores

Alrededor de la década de los sesenta, los ingenieros químicos comenzaron a estudiar los filtros percoladores empleando las técnicas relacionadas con su profesión. Esto significó un gran paso de avance, ya que al aplicarse los principios de la ingeniería química se obtienen modelos que, si bien pueden aún conservar cierto carácter estadístico en cuanto a la determinación de sus parámetros, sus bases deterministas permiten describir mejor su operación. En la actualidad, la modelación de filtros percoladores se lleva a cabo tanto por ingenieros civiles como por ingenieros químicos, pero siempre empleando estos principios.

Por otra parte, la aparición de otros tipos de reactores de biopelícula, como los de disco rotatorio, filtros sumergidos, biofiltros y reactores de lecho fluidificado, estimuló la búsqueda de criterios de diseño y métodos de modelación más unificados [19]. El vínculo de estos tipos de reactores con los filtros percoladores consiste en que todos en conjunto se basan en el mismo principio básico de funcionamiento, -en este caso la remoción de sustrato por la biopelícula-, distinguiéndose entre sí por su configuración específica.

La modelación actual de los filtros percoladores y de otros reactores de biopelícula se basa en la **teoría de la biopelícula**, que consiste en el empleo de las ecuaciones de fenómenos de transporte y la cinética de reproducción y cese de la actividad metabólica -o muerte- de los microorganismos para describir los procesos fundamentales que tienen lugar en la biopelícula. De manera general, este punto de vista toma en cuenta i) *el transporte de sustrato desde el seno del fluido hasta la superficie de la biopelícula*, ii) *el transporte y consumo de sustrato en el interior de la biopelícula* [20]-[24], iii) *la generación de productos metabólicos*, iv) *la re-*

producción y muerte de los microorganismos [25]-[30] y v) el desprendimiento de biomasa [31]-[33]. Adicionalmente se establecen un conjunto de ecuaciones que permiten tomar en cuenta la configuración específica del sistema bajo estudio y predecir el comportamiento global de la concentración de sustrato [34].

En el **Anexo C** se presentan algunos de los modelos actuales típicos de filtros percoladores.

2.1.5. Necesidad de un nuevo enfoque en el estudio y la modelación matemática de los filtros percoladores

En comparación con la modelación tradicional, la modelación actual de los filtros percoladores permite predecir mejor la interrelación entre las diferentes variables que describen su operación y el establecimiento de criterios de diseño más unificados [35]-[37].

No obstante, al igual que en la modelación tradicional, no se consideran las fluctuaciones que se presentan en la concentración, composición y flujo del agua residual de entrada [38]-[40], en las condiciones ambientales [41, 42] y en el espesor de la biopelícula [43], ni tampoco se predicen las fluctuaciones temporales de la concentración de sustrato de salida [9]. **Esta incapacidad se debe a la propia naturaleza de estas fluctuaciones, que hace que las mismas no puedan ser representadas matemáticamente como funciones analíticas desarrollables en serie de Taylor y, por lo tanto, no pueden ser modeladas desde el punto de vista determinista, lo que constituye una de las limitaciones de este enfoque.**

Recordando que las fluctuaciones temporales de la concentración de sustrato de salida afectan la confiabilidad de la operación de los filtros percoladores, es obvio que, para superar esta limitación de los modelos actuales deterministas, se precisa adoptar un nuevo punto de vista en el estudio de estos sistemas que permita describirlas.

2.2. Características fundamentales de las biopelículas

Por **biopelícula** se define a una población o comunidad de microorganismos que se desarrolla adherida a una superficie sólida previamente humedecida y en contacto con un fluido en el que se encuentren componentes biodegradables, nutrientes y microorganismos suspendidos, éstos últimos al menos en algún momento. Adicionalmente, las condiciones ambientales deben ser tales que favorezcan la reproducción y la actividad metabólica de los microorganismos [44].

Además de constituir la base principal de la operación de los filtros percoladores y otros tipos de reactores biológicos [45], las biopelículas están vinculadas con las caries y enfermedades parodontales, así como con otras patologías que se presentan en los pulmones y en el tracto urinario, son una de las razones por las

que se produce el ensuciamiento de piscinas y baños, transmiten enfermedades a través del empleo de instrumentos médicos mal esterilizados en los que se desarrollan y causan un sinnúmero de problemas en la industria, tales como el aumento de la resistencia a la transferencia de calor y de la resistencia friccional de los flúidos, afectaciones a la transferencia de masa que tiene lugar en los procesos de membrana y en las columnas de intercambio iónico y el deterioro de equipos y tuberías. Se calcula que en EEUU el uso de biocidas para eliminar los problemas causados por las biopelículas cuesta alrededor de mil millones de dólares al año [46]-[48].

Por estas razones, no es de sorprender que hayan sido desarrollados diferentes métodos experimentales para estudiar las características y el comportamiento de las biopelículas . En el **Anexo D** se presentan los más comúnmente usados en la actualidad y que se describen en la bibliografía consultada [49]-[52].

2.2.1. Estructura interna

De manera general, la estructura espacial interna de las biopelículas es altamente heterogénea y porosa, observándose que los microorganismos se unen entre sí y a la superficie del sólido mediante polímeros extracelulares y otros componentes que se presentan en menor proporción, tales como lípidos y proteínas [53]-[55]. Por otra parte, los microorganismos se agrupan formando conglomerados bien definidos y separados entre sí . Los espacios entre conglomerados, paralelos a la superficie del sólido, se denominan conductos, mientras que los perpendiculares se denominan poros, y ambos se encuentran usualmente llenos de agua. En el caso de los filtros percoladores [56], las biopelículas tienen estructuras parecidas a un conjunto de volcanes, con numerosas hendiduras que facilitan el transporte de oxígeno y nutrimentos y, adicionalmente, se presentan interacciones presa-depredador entre las especies que aumentan su heterogeneidad espacial [56, 57]. Al respecto, es interesante señalar que, de manera general, se ha podido comprobar experimentalmente que esta estructura heterogénea permite que exista un determinado flujo de agua en el interior de las biopelículas que influye en los procesos relacionados con el transporte y consumo de sustrato [58, 59].

Cuantitativamente, esta heterogeneidad se describe parcialmente a través de la porosidad y la tortuosidad [60, 61]. La porosidad se define como la fracción del volumen de agua con respecto al volumen total de la biopelícula, mientras que la tortuosidad relaciona la longitud efectiva de los poros en relación con la longitud total de la biopelícula.

2.2.2. Composición química y biológica

Las biopelículas están constituidas por componentes abióticos y bióticos. Los componentes abióticos comprenden las sustancias presentes en el seno del fluido y los productos del metabolismo de los microorganismos y de la lisis celular que se

quedan formando parte de la biopelícula [62, 63]. Los componentes bióticos son los microorganismos en sí.

Se ha podido evidenciar que la composición microbiológica de las biopelículas depende en gran medida de las condiciones ambientales y de la concentración y composición del fluido, encontrándose presentes protozoos, bacterias, algas e incluso larvas y otros organismos superiores [64]-[67]. También se ha establecido que la configuración específica del sistema en el que se desarrollan influye en la distribución de las especies presentes, observándose que en los filtros percoladores se encuentran menos microorganismos de tipo filamentosos que en los reactores de disco rotatorio [68].

La composición global de las biopelículas varía ampliamente en función de las condiciones bajo las que tiene lugar su desarrollo, encontrándose en la literatura consultada amplia información al respecto [45], [64]-[68]. De manera general, la misma se muestra en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Composición global [45]

| COMPONENTE | % EN VOLUMEN |
|------------|--------------|
| Agua | 85-96 |
| Bióticos | 1.9-3.2 |
| Abióticos | 0.8-11.7 |

2.2.3. Evolución temporal

La evolución temporal del espesor de las biopelículas responde aproximadamente a una curva sigmoide [69, 70], pudiendo distinguirse cinco fases fundamentales: i) **fase de retardo**, ii) **fase de crecimiento exponencial**, iii) **fase de decrecimiento**, iv) **fase de estado estacionario** y v) **fase de desprendimiento**. Este comportamiento se muestra en la figura 2.1.

La **fase de retardo** corresponde a las primeras etapas de formación de las biopelículas [71]-[73]. En ésta tiene lugar el transporte de moléculas orgánicas y microorganismos desde el seno del fluido hasta la superficie del sólido, y el atrapamiento reversible de los microorganismos a través de fuerzas electrostáticas, de tensión superficial y de van der Waals. Posteriormente, debido fundamentalmente a la acción de los polímeros extracelulares y otros productos metabólicos, éstos se quedan atrapados de forma irreversible, dando comienzo al crecimiento propiamente dicho de la biopelícula. Es importante aclarar que, aunque existen algunas evidencias experimentales al respecto, en realidad no se conoce con exactitud qué mecanismos específicos gobiernan el atrapamiento irreversible de los microorganismos [74].

En la **fase de crecimiento exponencial** tiene lugar la reproducción de los microorganismos y el desprendimiento de pequeñas porciones de biopelícula

debido a la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido. La característica fundamental de esta fase consiste en que la velocidad de reproducción es mucho mayor que la velocidad de desprendimiento, de tal forma que el efecto neto es un relativo rápido incremento temporal del espesor de la biopelícula.

La **fase de decrecimiento** se caracteriza porque la velocidad de desprendimiento por erosión aumenta con el tiempo hasta hacerse comparable a la velocidad de reproducción, aunque siempre es más pequeña que ésta. Como resultado, si bien continúa el incremento temporal del espesor, la velocidad a la que tiene lugar este proceso comienza a disminuir.

En la **fase de estado estacionario** la velocidad de reproducción se iguala a la velocidad de desprendimiento por erosión [75, 76], de tal forma que la cantidad de biopelícula permanece prácticamente constante en el tiempo. El espesor correspondiente a esta fase se denomina **espesor de estado estacionario**.

En la **fase de desprendimiento**, como su nombre sugiere, tiene lugar el desprendimiento de partículas de biopelícula de tamaño comparable a su espesor. Este fenómeno ocurre esporádicamente y sus causas, aunque no se conocen con exactitud, son atribuidas a la producción de gases por efecto del metabolismo anaerobio que tiene lugar en las zonas más alejadas de la superficie de la biomasa y al debilitamiento de la fuerza de adhesión entre los polímeros extracelulares y la superficie del sólido producto del envejecimiento de la biopelícula [1, 77].

Por otra parte, es importante señalar que **las mediciones experimentales han demostrado que, en realidad, el espesor de las biopelículas no toma un valor fijo y determinista para unas condiciones dadas, sino que tiende a variar espacial y temporalmente alrededor de un valor promedio**. Estas fluctuaciones se producen debido a cambios en las condiciones bajo las que tiene lugar el desarrollo de la biopelícula y a los procesos de crecimiento y desprendimiento de biomasa, y se describen cuantitativamente a través de la **rugosidad** [78]-[80]. Este parámetro se determina experimentalmente, y se identifica con la desviación típica de los valores de medidos de espesor puntual.

2.2.4. Transferencia de masa y consumo de sustrato en las biopelículas

Se ha observado que los microorganismos que se desarrollan atrapados en la superficie de un sólido presentan una mayor actividad que cuando crecen suspendidos en el seno de un fluido. Aunque no está claro de por qué ocurre este fenómeno, hipotéticamente se atribuye a cambios genéticos y fisiológicos, a modificaciones hidrodinámicas provocadas por la biopelícula que facilitan el transporte de sustrato y a un posible efecto selectivo de los polímeros extracelulares hacia el sustrato presente en el seno del fluido [81, 82].

Por otra parte, los microorganismos que forman las biopelículas son capaces de utilizar partículas coloidales como fuente de sustrato. El mecanismo que gobierna

este fenómeno no está totalmente claro, pero, según una primera hipótesis, parece ser que estas partículas tienden a quedar atrapadas en la biomasa y convertidas en sustrato soluble por la acción de las enzimas excretadas por los microorganismos [1]. Recientemente ha sido propuesta una segunda hipótesis, que plantea que las enzimas se difunden desde la biopelícula hasta el seno del fluido donde, por la acción de éstas, las partículas coloidales se convierten en sustancias solubles [83].

Por otra parte, la presencia de flujo en el interior de las biopelículas permite que el sustrato se transfiera por difusión y convección en los poros y conductos, mientras que en el interior de los conglomerados el mecanismo de transporte es de tipo difusivo. Aunque en realidad el oxígeno y el sustrato se transfieren tanto en la dirección paralela como en la perpendicular a la superficie del sólido, generalmente predomina la transferencia en la dirección vertical [84, 85].

La resistencia a la transferencia de masa, junto al consumo de sustrato y oxígeno, hacen que se establezca un determinado perfil espacial de concentración con respecto al espesor total de la biopelícula [86, 87], a partir del cual pueden ser distinguidas tres zonas fundamentales: i) *una zona aerobia, próxima a la superficie de la biomasa, en donde la presencia de oxígeno garantiza que la remoción de sustrato se lleve a cabo por el mecanismo aerobio*, ii) *una zona anaerobia, donde no existe oxígeno disponible, pero sí sustrato suficiente como para permitir el desarrollo de una comunidad de microorganismos anaerobios y/o facultativos*, y iii) *una zona no activa, próxima a la superficie del sólido, donde la no disponibilidad de sustrato hace que se produzca el cese de toda actividad metabólica o muerte de los microorganismos*. Estas zonas, y los respectivos perfiles de oxígeno y sustrato, se muestran en la figura 2.2.

No en todas las biopelículas se encuentran estas tres zonas. Por ejemplo, si no hay oxígeno en el sistema, estará ausente la zona aerobia [88], mientras que si la concentración de éste es lo suficientemente alta puede no estar presente la zona anaerobia. Por otra parte, la existencia de la zona no activa se puede evitar si el espesor es pequeño y existe una concentración suficientemente alta de sustrato. En el caso particular de los filtros percoladores, suelen presentarse las tres zonas simultáneamente [89]-[91], razón por la que en realidad los mismos son facultativos, aunque suelen clasificarse como sistemas aerobios.

2.2.5. Necesidad de un nuevo enfoque en el estudio y modelación de las biopelículas

El comportamiento del espesor de las biopelículas con respecto al tiempo ha sido modelado mediante el empleo de métodos deterministas, específicamente en base a la **teoría de la biopelícula**. Sin embargo, cuando se comparan los resultados teóricos con los experimentales, se observa que **los modelos deterministas actuales sólo predicen el comportamiento del valor esperado del espesor de la biopelícula, y no pueden describir las fluctuaciones**

temporales que se producen alrededor de este valor ni la rugosidad de la biopelícula. Esto se debe a que, debido a la propia naturaleza de este enfoque, se supone que la temperatura, concentración, composición y flujo de residual se representan como variables deterministas, despreciándose las fluctuaciones temporales que se producen alrededor de sus valores. Por otra parte, sólo analizan el comportamiento de la biomasa en su conjunto, no considerando explícitamente los procesos elementales que tienen lugar a nivel de cada microorganismo individual.

Sin embargo, tomando en cuenta que las fluctuaciones temporales del espesor de biomasa pueden afectar el comportamiento operativo de los filtros percoladores y de otros tipos de reactores de biopelícula, resulta conveniente disponer de modelos matemáticos que permitan predecirlas. Evidentemente esto implica que es necesario suponer un punto de vista diferente al determinista en el estudio y modelación de las biopelículas.

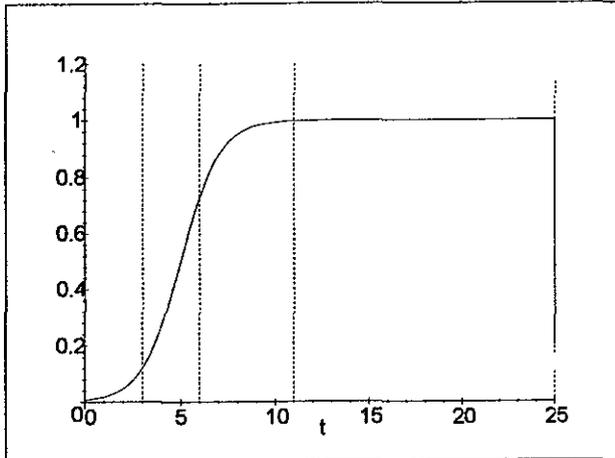


Figura 2.1. Espesor vs. tiempo para una biopelícula arbitraria. $(0 < t \leq 3)$: fase de retraso, $(3 < t \leq 6)$: fase exponencial, $(6 < t \leq 11)$: fase de decrecimiento, $(11 < t \leq 25)$: fase de estado estacionario, $(25 < t)$: fase de desprendimiento.

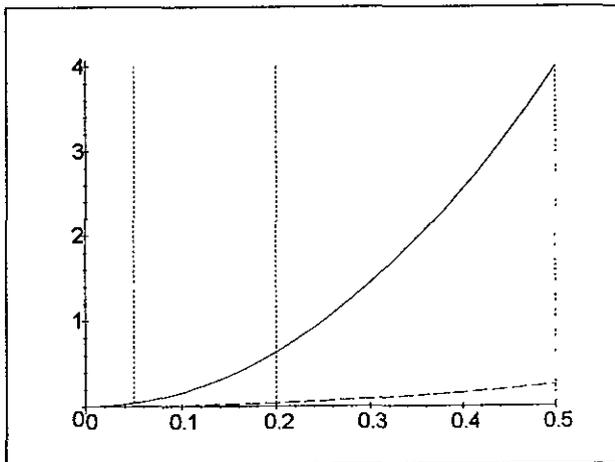


Figura 2.2. Concentración vs. Espesor en una biopelícula arbitraria (—): sustrato, (- -): oxígeno. $0 < E \leq 0.05$: Zona no activa, $0.05 < E \leq 0.2$: Zona anaerobia, $0.2 < E \leq 0.5$: Zona aerobia.

3. Métodos de modelación estocástica

Existen fenómenos en la naturaleza que se caracterizan porque las variables que los describen fluctúan de manera altamente irregular en el tiempo y en el espacio. Además presentan la característica de que, debido a la naturaleza de estas fluctuaciones, las mismas no pueden ser representadas como funciones analíticas desarrollables en serie de Taylor, por lo que los métodos matemáticos usuales de análisis no pueden ser utilizados. Por otra parte, estas fluctuaciones son un fenómeno que depende intrínsecamente del tiempo y, por lo tanto, tampoco pueden modelarse empleando exclusivamente métodos estadísticos que no toman en cuenta esta variable y que se basan en considerar que las mismas son despreciables. Así que para poder describirlas es necesario emplear un conjunto de conceptos y métodos matemáticamente apropiados, conocidos como **métodos estocásticos**.

El enfoque estocástico en el estudio de los fenómenos físicos y químicos fue introducido exitosamente a principios de siglo en el estudio del movimiento browniano. En 1827 Robert Brown observó que pequeños granos de polen suspendidos en agua permanecen constantemente en estado de movimiento irregular. Este fenómeno no pudo ser entendido físicamente y modelado matemáticamente hasta que Einstein, en 1905, lo enfocó desde el punto de vista estocástico. Posteriormente, los conceptos y métodos empleados por Einstein fueron generalizados y aplicados a la descripción de numerosos fenómenos físicos, químicos y biológicos que tienen lugar en la naturaleza [92].

Las fluctuaciones en una variable se definen como la diferencia entre el valor real que toma la variable y su valor esperado o promedio, en otras palabras, se identifican con las desviaciones respecto al valor esperado. Al respecto, es importante distinguir entre las diferentes situaciones que se pueden presentar. Puede ser que las fluctuaciones sean muy pequeñas en comparación con el valor esperado de las variables que describen el sistema bajo estudio. En este caso pueden despreciarse y, por tanto, pueden ser empleadas las técnicas de modelación deterministas y estadísticas sin que existan grandes errores. En otras situaciones, sin embargo, las fluctuaciones son de una magnitud comparable al valor esperado mismo y, en este caso, no sólo no pueden despreciarse, sino que juegan un papel esencial en el comportamiento dinámico del sistema. Son estas situaciones en las que es necesario utilizar métodos estocásticos. Desde el punto de vista físico

ésto ocurre, por ejemplo, cuando los sistemas se encuentran en la vecindad de un estado termodinámico inestable o cerca de un punto crítico [93].

El punto de vista estocástico se ha investigado y desarrollado ampliamente en las últimas dos décadas y ha extendido sus aplicaciones a la descripción de fenómenos y áreas de interés en la ingeniería química. Entre éstas pueden señalarse, por ejemplo, i) *estimación de tiempos de residencia en reactores* [94], ii) *reacciones químicas complejas* [95], iii) *cámaras de burbujas* [96], iv) *procesos de fluidificación* [97], v) *transporte a través de medios porosos* [98], vi) *procesos de coagulación-floculación* [99] y vii) *dinámica de polímeros* [100].

3.1. Descripción mesoscópica

En el estudio de sistemas abiertos es importante distinguir entre fluctuaciones externas e internas. Esta diferencia, depende, por supuesto, de cómo es definido el sistema. En la práctica, sin embargo, debe ser establecida una clara diferencia entre el sistema y los parámetros externos que actúan sobre éste para poder hacer esta distinción [101]. Las **fluctuaciones internas** son generadas en el sistema mismo y tienen su origen en el gran número de grados de libertad que no son considerados en su descripción estadística. Su estudio es una parte bien conocida de la mecánica estadística en el equilibrio y cerca del equilibrio y tienen la importante propiedad de que escalan con el inverso del tamaño del sistema, por lo que tienden a anularse en el límite termodinámico, excepto en el punto crítico donde sus valores son significativos. En contraste, las **fluctuaciones externas** se presentan cuando los parámetros externos del sistema toman valores aleatorios, por lo que su origen tiene lugar fuera del sistema y se debe a la aleatoriedad intrínseca natural del ambiente.

Por otra parte, la descripción macroscópica o determinista de un fenómeno dado se basa en el hecho de que es posible seleccionar un pequeño conjunto de variables de estado de forma tal que el comportamiento del sistema pueda describirse en función de éstas, no considerando explícitamente los procesos que ocurren a nivel microscópico. Las soluciones de las ecuaciones de evolución temporal de las variables correspondientes que se obtienen son, usualmente, funciones analíticas desarrollables en serie de Taylor. Precisamente el no considerar explícitamente el comportamiento microscópico le confiere un carácter aproximado a los modelos deterministas, que se refleja en la presencia de las fluctuaciones internas. Cuando estas fluctuaciones se toman en cuenta como una manifestación de los grados de libertad microscópicos sobre el comportamiento macroscópico, se obtiene una **descripción mesoscópica** del sistema (capítulo 3, referencia [102]).

La descripción mesoscópica permite predecir, tanto el comportamiento macroscópico o determinista de un fenómeno dado, como el de las fluctuaciones temporales que se producen en éste. Por esta razón constituyen un punto intermedio entre la descripción macroscópica y la microscópica y a la vez una descripción más amplia

que la determinista.

3.2. Elementos de la teoría de procesos estocásticos

3.2.1. Variable aleatoria y proceso estocástico

Se define a una **variable aleatoria** X como aquella que puede tomar un conjunto de valores posibles dentro de un dominio dado y cada uno de ellos lo puede tomar con una determinada probabilidad representada por una función de distribución de probabilidad $P(x)$. Esta función especifica la probabilidad de que la variable X tome el valor x . El dominio de una variable aleatoria puede estar constituido por valores continuos, separados o "discretos" o ambos.

Se define a un **proceso estocástico** (capítulo 3, referencia [102]) como una función Y de una variable aleatoria X y de una variable determinista t , que en las aplicaciones físicas es usualmente el tiempo, de tal forma que:

$$Y = f(X, t). \quad (3.1)$$

De acuerdo con la definición anterior, la variable Y también tiene asociada una función de distribución de probabilidad $P(y, t)$ que especifica la probabilidad de que Y tome el valor de y en el instante de tiempo t . A partir de aquí resulta claro que cuando se especifique la **probabilidad conjunta** para n puntos $P(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n)$ ésta representa la probabilidad de que Y tome el valor y_1 al tiempo t_1 y el valor y_2 al tiempo t_2 , y así sucesivamente hasta que tome el valor y_n al tiempo t_n . Las probabilidades conjuntas definidas para 1, 2, ..., n puntos forman una **jerarquía de distribuciones de probabilidad conjuntas**. El conjunto de todas ellas contiene la misma información que $P(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n)$. De acuerdo con esto, si se conoce la jerarquía de probabilidad conjunta completa, el proceso estará totalmente especificado, porque se conocen todos los valores posibles que puede tomar Y a los tiempos correspondientes. Sin embargo, no siempre es posible conocer la jerarquía completa; lo usual es que se disponga sólo de información parcial contenida en las probabilidades conjuntas para pequeños valores de n .

Los procesos estocásticos se pueden caracterizar a partir de sus **momentos** los que se calculan a partir de la siguiente relación:

$$\langle Y(t_1) Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle = \int Y_1 Y_2 \dots Y_n P(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) dy_1 dy_2 \dots dy_n. \quad (3.2)$$

Según el teorema de Khinchin [103, 104], *un proceso estocástico queda totalmente especificado a través del conjunto de todos sus momentos*. Dicho de otra manera, un proceso estocástico puede ser descrito totalmente mediante el conocimiento de todos sus momentos o de la jerarquía completa de las probabilidades conjuntas, ya que existe una equivalencia entre ambos.

Al respecto, conviene señalar que en numerosas ocasiones se modela el comportamiento estocástico de los sistemas en el estado estacionario o de equilibrio, o en las cercanías de éste. Ha sido bien demostrado que para estos casos la función de distribución de probabilidad correspondiente es normal o gaussiana, por lo que el proceso estocástico se describe completamente en función del comportamiento temporal de sus dos primeros momentos que están relacionados con el **valor esperado** $\langle Y \rangle_t$ y la **varianza** $\sigma_{Y,t}^2$ de Y , y que se calculan de acuerdo a las siguientes relaciones:

$$\langle Y \rangle_t = \int_x Y(t) P(x, t) dx, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{Y,t}^2 &= \int_x Y^2(t) P(x, t) dx - \langle Y(t) \rangle \langle Y(t) \rangle \\ &= \langle Y^2(t) \rangle - \langle Y(t) \rangle \langle Y(t) \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

La **probabilidad condicional** $P(y_n, t_n / y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$ representa la probabilidad de que la variable Y tome el valor de y_n al tiempo t_n cuando se sabe que ha tomado el valor de y_1 al tiempo t_1 , el valor y_2 al tiempo t_2 , y así sucesivamente hasta el valor de y_{n-1} al tiempo t_{n-1} , debiendo cumplirse que $t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n$. La probabilidad condicional juega un importante papel en los métodos estocásticos que se emplean en la actualidad, tal y como se verá posteriormente.

De especial importancia es la **función de autocorrelación** que es una combinación de los dos primeros momentos definida por:

$$K(t_1, t_2) = \langle Y(t_1) Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle. \quad (3.5)$$

La importancia de esta cantidad reside en el hecho de que es una medida de la correlación existente entre los valores medidos de Y a tiempos diferentes y a medida que el tiempo entre las mediciones aumenta, esta función disminuye. Por lo general existe un intervalo de tiempo T entre las mediciones, para el cual la función de autocorrelación se hace cero o despreciable, denominado **tiempo de autocorrelación**. Este tiempo puede ser medido experimentalmente en muchos de los fenómenos que se estudian desde el punto de vista estocástico, y se emplea para comparar los resultados teóricos con los observados y establecer el alcance y las limitaciones de los modelos que se obtienen [105].

Un proceso estocástico es **estacionario** cuando sus momentos permanecen constantes en el tiempo y la función de autocorrelación sólo depende del intervalo de tiempo entre las mediciones y no de los valores específicos de tiempo. Matemáticamente esto se representa por:

$$\langle Y(t_1 + \tau) Y(t_2 + \tau) \dots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1) Y(t_2) \dots Y(t_n) \rangle. \quad (3.6)$$

3.2.2. Procesos de Markov

Los procesos de Markov o markovianos son una clase particular de procesos estocásticos que cumplen con la propiedad de Markov. Esta es una propiedad muy importante, ya que simplifica en gran medida el tratamiento matemático involucrado al estudiar este tipo de proceso. En la actualidad puede decirse que la gran mayoría de los métodos estocásticos más desarrollados se refieren a procesos markovianos (capítulo 4, referencia [102]).

Un **proceso de Markov** está definido como aquel proceso estocástico en el que las probabilidades condicionales cumplen con la siguiente relación:

$$P(y_n, t_n / y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P(y_n, t_n / y_{n-1}, t_{n-1}). \quad (3.7)$$

Esto significa que el valor que la variable Y tomará en un instante futuro depende exclusivamente de su valor en el presente y no de los valores previos a éste, es decir, no depende de su comportamiento histórico anterior. En este caso $P(y_n, t_n / y_{n-1}, t_{n-1})$ se identifica con la **probabilidad de transición** $P_{1/1}$ de que Y cambie su valor de y_{n-1} a y_n durante el intervalo de tiempo $\Delta t = t_n - t_{n-1}$. Aquellos procesos markovianos que cumplen que su probabilidad de transición depende sólo de Δt son llamados **procesos homogéneos**.

Así pues, resulta que un proceso de Markov queda totalmente identificado a través de la probabilidad P_1 y la probabilidad de transición $P_{1/1}$, ya que a partir de éstas puede ser construida la jerarquía total de las funciones de probabilidad conjunta. Por ejemplo, tomando $t_1 < t_2 < t_3$:

$$P(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1) P_{1/1}(y_2, t_2 / y_1, t_1) P_{1/1}(y_3, t_3 / y_2, t_2). \quad (3.8)$$

Nótese que si se toman en cuenta todos los posibles estados intermedios en la relación anterior, integrando sobre y_2 , y dividiendo por $P_{1/1}(y_1, t_1)$, se obtiene

$$P_{1/1}(y_3, t_3 / y_1, t_1) = \int P_{1/1}(y_3, t_3 / y_2, t_2) P_{1/1}(y_2, t_2 / y_1, t_1) dy_2, \quad (3.9)$$

que es la llamada **ecuación de Chapman-Kolmogorov**.

Las funciones P_1 y $P_{1/1}$ que caracterizan a un proceso de Markov no pueden ser seleccionadas arbitrariamente. Éstas deben obedecer la ecuación de Chapman-Kolmogorov y la relación necesaria y obvia:

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_{1/1}(y_2, t_2 / y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) dy_1. \quad (3.10)$$

3.2.3. Procesos estocásticos de un paso

Los **procesos estocásticos de un paso** se caracterizan por el hecho de que las variables que los describen tienen un dominio separado o "discreto" de valores

(capítulo 6, referencia [102]). Esta característica en realidad ocurre estrictamente en todos los fenómenos físicos, químicos y biológicos debido a la naturaleza cuántica de la materia. Estas variables pueden ser, por ejemplo, el número de átomos de una sustancia elemental, el número de moléculas de los componentes que participan en una reacción química, el número de microorganismos presentes en un proceso biológico, el número de partículas elementales en una reacción nuclear, etc. Sin embargo, es importante destacar que no todos los fenómenos que se describen a través de variables separadas o "discretas" pueden analizarse como procesos de un paso. En gran medida esta caracterización depende del nivel de descripción que se adopte, pero es necesario que el cambio que se produce en la variable como resultado de los eventos elementales que tienen lugar en el sistema sea un número finito.

3.2.4. Ecuación Maestra

La **Ecuación Maestra (EM)** es la versión diferencial de la ecuación de Chapman-Kolmogorov (3.9), como se verá a continuación [92, 102]. Considérese un proceso de Markov homogéneo, de tal forma que las probabilidades de transición pueden ser representadas por:

$$P_{1/1}(y_n, t_n / y_{n-1}, t_{n-1}) = \Gamma_\tau(y_n / y_{n-1}) \text{ donde } \tau = t_n - t_{n-1}, \quad (3.11)$$

entonces la ecuación de Chapman-Kolmogorov (3.9) puede ser reescrita como:

$$\Gamma_{\tau+\tau'}(y_3/y_1) = \int \Gamma_{\tau'}(y_3/y_2) \Gamma_\tau(y_2/y_1) dy_2. \quad (3.12)$$

Por otra parte, para pequeños valores de τ' las probabilidades de transición Γ_τ pueden desarrollarse en serie de potencias de τ expresándose de la forma:

$$\Gamma_{\tau'}(y_3/y_2) = (1 - a_0\tau') \delta(y_3 - y_2) + \tau'W(y_3/y_2) + O(\tau'), \quad (3.13)$$

en donde $W(y_3/y_2)$ representa la **probabilidad de transición** de que Y cambie su valor de y_2 a y_3 en la **unidad de tiempo**, siendo por tanto mayor o igual que 0, y a_0 se define como:

$$a_0(y_2) = \int W(y_3/y_2) dy_3. \quad (3.14)$$

Si en la ecuación (3.12) se sustituye la ecuación (3.13), se divide por τ' , y se aplica límite para $\tau' \rightarrow 0$ se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Gamma_\tau(y_3/y_1) = \int \{W(y_3/y_2) \Gamma_\tau(y_2/y_1) - W(y_2/y_3) \Gamma_\tau(y_3/y_1)\} dy_2. \quad (3.15)$$

La ecuación (3.15) es la llamada **Ecuación Maestra** y puede reescribirse como una *ecuación íntegro-diferencial* para la probabilidad de un punto $P(y, t)$, la cual representa la probabilidad de que la variable Y tome el valor y al tiempo t :

$$\frac{\partial P(y, t)}{\partial t} = \int \{W(y/y') P(y', t) - W(y'/y) P(y, t)\} dy'. \quad (3.16)$$

Obsérvese que la EM (3.16) es en realidad una ecuación de balance de probabilidad. El término de la izquierda representa la tasa de variación temporal de la probabilidad que se debe a i) *la ganancia de probabilidad por las transiciones desde los estados y' al estado y , representada en el primer término del miembro derecho*, y a ii) *la pérdida de probabilidad producida por las transiciones desde el estado y hacia otros estados y' , representada en el segundo término del miembro derecho*.

Es esencial destacar que la **Ecuación Maestra incluye dos escalas de tiempo totalmente diferentes** (capítulo 5, referencia [102]). Una de ellas está implícita en las probabilidades de transición por unidad de tiempo $W(y/y')$ y está asociada a los tiempos que caracterizan los eventos elementales que tienen lugar en el sistema y que se manifiestan en los cambios de la variable estocástica correspondiente, por lo que es una *propiedad temporal intrínseca del sistema determinada por su naturaleza física*. La otra escala de tiempo es la que determina la variación temporal de $P(y, t)$ y está representada por la variable continua t , apareciendo en forma explícita en las probabilidades y en el operador diferencial en el miembro izquierdo de la ecuación (3.16). Esta escala está relacionada con la *evolución temporal de la variable estocástica Y* que caracteriza al fenómeno bajo estudio.

Cuando el dominio de Y es "discreto", la EM es una *ecuación diferencial en diferencias finitas* que se escribe como:

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_{n'} \{W_{nn'} P_{n'}(t) - W_{n'n} P_n(t)\}. \quad (3.17)$$

Para el caso específico de los procesos de un paso se puede mostrar fácilmente que la EM (3.17) adquiere la forma:

$$\frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_A W_A(n - r_A) P(n - r_A, t) - \sum_A W_A(n) P(n, t), \quad (3.18)$$

donde W_A representa la probabilidad de transición por unidad de tiempo asociada al evento elemental A y r_A es un parámetro asociado al número de entidades que se producen o se consumen al tener lugar el evento A (capítulo 5, referencia [102]).

3.2.5. Métodos de solución de la Ecuación Maestra

De la discusión anterior resulta claro que la cantidad central que es preciso calcular para obtener una descripción estocástica de un fenómeno dado es la distribución de probabilidad $P(y, t)$ asociada a las variables que lo caracterizan. Como esta cantidad obedece a la EM, el problema matemático consiste entonces en resolver esta ecuación para condiciones iniciales y/o de fronteras dadas.

Antes de discutir en más detalle los métodos de solución de la EM, es importante observar que ésta es siempre una ecuación lineal en la función de distribución de probabilidad $P(y, t)$. Sin embargo, en la literatura con frecuencia se habla de ecuaciones maestras no lineales (capítulos 5 y 6, referencia [102]). Esta clasificación se refiere a la forma en que las probabilidades de transición por unidad de tiempo $W(y'/y)$ dependen de las variables aleatorias independientes y y y' . Cuando esta dependencia es no lineal se dice que la EM es **no lineal**. En este sentido, cuando la EM es **lineal**, las técnicas de solución más usuales son el *método de los momentos* y *soluciones mediante funciones generadoras* (capítulo 5, referencia [102]). En ocasiones estas técnicas permiten obtener soluciones analíticas, pero con frecuencia es imposible obtener soluciones analíticas explícitas. Otra alternativa, muy común, consiste en aproximar la EM por una ecuación diferencial, la llamada *Ecuación de Focker-Planck* correspondiente (capítulo 8, referencia [102]). Esto es posible cuando $P(y, t)$ varía suavemente con la variable y . Como en este trabajo no fue necesario aplicar este método de solución no se abundará más en él.

En el caso no lineal la situación es mucho más complicada y es prácticamente inevitable el recurrir a métodos aproximados. Entre éstos el método mejor establecido es el introducido por van Kampen y llamado comúnmente **método de desarrollo en Ω** (capítulo 10, referencia [102]). La filosofía básica de este método consiste en el desarrollo de la EM en una serie de potencias inversas con respecto a un parámetro pequeño, el que a su vez permita *pesar* la magnitud de los diferentes términos de la ecuación. La selección de este parámetro depende, obviamente, del sistema elegido, pero debe ser una medida del *tamaño del sistema*, debido a que es bien conocido que los cambios espaciales y temporales que tienen lugar en las variables macroscópicas estocásticas como resultado de las fluctuaciones internas tienden a anularse cuando el tamaño del sistema aumenta. Al respecto, conviene señalar que el comportamiento de las variables intensivas es el resultado, en última instancia, del comportamiento de *todas* las partículas microscópicas que caracterizan al sistema. por lo que es de esperar que la importancia de las fluctuaciones internas sea pequeña cuando el tamaño del sistema es muy grande. En este sentido Ω *escala las fluctuaciones internas*, de modo que los términos con potencias mayores de Ω^{-1} son menos importantes en la EM.

Una vez que para el sistema bajo estudio se selecciona el parámetro de desarrollo Ω el primer paso a seguir es escribir la probabilidad de transición en la unidad de tiempo en función de este parámetro, para lo cual $W(y/y')$ se reescribe

en función del tamaño del salto $\Delta y = y - y'$ y del punto inicial y' , estableciéndose:

$$W(y/y') = W(y', \Delta y), \quad (3.19)$$

donde la variable y puede ser una variable intensiva o extensiva. En este caso se va a estipular que la misma es extensiva y la variable intensiva x correspondiente se determina como:

$$x = \frac{y}{\Omega}, \quad (3.20)$$

por lo que es posible expresar las probabilidades de transición en la unidad de tiempo en función del parámetro de desarrollo, de tal forma que:

$$W(y', \Delta y) \equiv \Phi(x', \Delta y) = \Phi\left(\frac{y'}{\Omega}, \Delta y\right). \quad (3.21)$$

Nótese que en la ecuación (3.21) la probabilidad de transición en la unidad de tiempo depende de una variable intensiva y del tamaño del salto. La posibilidad de expresar la probabilidad W en esta forma se basa en el hecho de que la probabilidad de que se realice un salto está determinada por el estado termodinámico del sistema, el que a su vez es una función de la variable intensiva que lo describe.

En este caso, la aplicación del método de desarrollo en Ω establece que la probabilidad de transición por unidad de tiempo sea desarrollada en series de potencias de este parámetro, lo que matemáticamente se expresa como:

$$W(y/y') = f(\Omega) \left[\Phi_0\left(\frac{y'}{\Omega}, \Delta y\right) + \Phi_1\left(\frac{y'}{\Omega}, \Delta y\right) + \dots \right], \quad (3.22)$$

donde el factor $f(\Omega)$ puede ser tomado en cuenta implícitamente en la variable tiempo mediante un cambio de la escala temporal.

Como consecuencia de haber expresado $W(y/y')$ de acuerdo con las ecuaciones (3.21) y (3.22) los momentos de orden M de la probabilidad de transición por unidad de tiempo, usualmente llamados momentos del salto de orden M , se pueden expresar de la forma:

$$\begin{aligned} \alpha_M(y) &\equiv \int (y - y')^M W(y/y') dy' \\ &= \int (\Delta y)^M \Phi(x, \Delta y) d\Delta y \\ &= \alpha_M(x), \end{aligned} \quad (3.23)$$

y nótese que éstos son también funciones de Ω . De forma general en este caso se cumple:

$$\alpha_M(y) = f(\Omega) \alpha_M\left(\frac{y}{\Omega}\right). \quad (3.24)$$

El segundo paso consiste en anticipar la forma en la que la solución P involucra a Ω . Para ello hay que tomar en cuenta que en situaciones de no equilibrio y es del orden de Ω , ya que se estableció que y es una variable extensiva. Por esta razón x será de orden 1, de acuerdo a la ecuación (3.20), es decir, será independiente del tamaño del sistema, acorde con el hecho de que se definió como una variable intensiva. Por otra parte, es bien conocido que en el equilibrio las fluctuaciones asociadas a y son normales o gaussianas y por ende del orden $\Omega^{\frac{1}{2}}$. Por lo tanto, con vistas a tomar en cuenta estos aspectos, van Kampen propone que y consista de dos partes: una parte macroscópica o determinista $\Omega\varphi(t)$, donde su dependencia temporal es descrita por una función desconocida $\varphi(t)$, y una parte fluctuante de orden $\Omega^{\frac{1}{2}}$ descrita por una nueva variable ζ . Todo esto puede ser expresado matemáticamente por la transformación de variables:

$$y = \Omega\varphi(t) + \Omega^{\frac{1}{2}}\zeta, \quad (3.25)$$

y como resultado se cumple entonces la siguiente relación entre la probabilidad P y Ω :

$$P(y, t) \rightarrow P\left(\Omega\varphi(t) + \Omega^{\frac{1}{2}}\zeta, t\right) \equiv \pi(\zeta, t). \quad (3.26)$$

Si las ecuaciones (3.22), (3.25) y (3.26) se sustituyen en la EM (3.16) se obtiene la ecuación correspondiente para $\pi(\zeta, t)$. La expresión resultante tiene la ventaja de que puede ser reescrita tomando como factor común las potencias de Ω . En este caso, los términos correspondientes a $\Omega^{-\frac{1}{2}}$ responden a la relación:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \alpha_1(\varphi), \quad (3.27)$$

donde recordando que φ describe la evolución temporal de la parte macroscópica de y , la ecuación (3.27) debe corresponder con la **ecuación macroscópica** del sistema.

Por otra parte, los términos correspondientes a Ω^0 definen la siguiente relación:

$$\frac{\partial}{\partial t}\pi(\zeta, t) = -\alpha_1'(\varphi)\frac{\partial}{\partial\zeta}\zeta\pi + \frac{1}{2}\alpha_2(\varphi)\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2}\pi, \quad (3.28)$$

donde el superíndice ' representa la derivada con respecto a φ . La ecuación (3.28) es una ecuación de Focker-Planck lineal y describe las **fluctuaciones temporales** alrededor de la parte macroscópica. El hecho de que sus coeficientes dependan del tiempo indica que se incluye el caso de que el sistema se encuentre en estado de no equilibrio o no estacionario. Esta ecuación se reduce a una ecuación de Focker-Planck ordinaria si se consideran las fluctuaciones alrededor de la solución estacionaria de la ecuación (3.27), o si α_1 es una función lineal y α_2 es una constante.

Si es posible encontrar una solución de la ecuación (3.27) para alguna condición inicial φ_0 , a su vez es posible encontrar la solución de la ecuación (3.28) para la condición inicial:

$$\pi(\zeta, 0) = \delta(\zeta), \quad (3.29)$$

que constituye la solución de aquella parte de la **EM** que corresponde a los términos de Ω^0 .

En la aplicación del método de desarrollo de van Kampen suelen tomarse sólo estos dos primeros términos del desarrollo, lo que se denomina **aproximación lineal al ruido** (capítulo 10, referencia 3.11). Esto permite determinar, con relativa facilidad, la solución de la **EM**, pero sólo puede aplicarse cuando i) *los términos que acompañan a $\Omega^{1/2}$ al expandir en series la EM corresponden a la ecuación macroscópica determinista del sistema*, ii) *la distribución de probabilidad asociada a las fluctuaciones ζ alrededor de la variable intensiva N es normal o gaussiana, lo que se cumple cuando los sistemas se encuentran en estado estacionario o de equilibrio* y iii) *los valores deterministas de las variables macroscópicas puedan ser identificados con sus correspondientes valores esperados o promedios*. Cuando estas condiciones no se cumplen es necesario tomar en cuenta otros términos del desarrollo en Ω , lo que usualmente conlleva a un aumento en complejidad desde el punto de vista matemático.

El método introducido por van Kampen significó un importante aporte en la teoría de los procesos estocásticos ya que, además de permitir encontrar una solución aproximada de la **EM** para el caso no lineal, en muchos fenómenos, afortunadamente, pueden ser establecidas las consideraciones anteriores relacionadas con el método de desarrollo en Ω , de ahí que este método sea tan comúnmente usado.

4. Descripción estocástica de biopelículas

Como fue señalado en el capítulo 2, resulta conveniente disponer de modelos matemáticos que permitan describir las fluctuaciones que se producen en el espesor de las biopelículas por los efectos que pueden ocasionar en los procesos relacionados con éstas. Habiéndose analizado la imposibilidad de las técnicas deterministas y estadísticas para tomar en cuenta estas fluctuaciones, se propone modelar desde el punto de vista *mesoscópico* el comportamiento temporal del espesor. Esto implica identificar a esta variable con una función o variable estocástica, y aplicar los métodos y principios descritos en el capítulo 3.

En este capítulo se presentan un conjunto de modelos estocásticos que permiten describir el comportamiento de las biopelículas considerando tres casos: **Caso 1:** *biopelícula uniespecie sin desprendimiento*, **Caso 2:** *biopelícula uniespecie con erosión* y **Caso 3:** *biopelícula multiespecie con erosión*. Al respecto, conviene señalar que estos modelos sólo permiten predecir las fluctuaciones internas temporales del espesor debido a las consideraciones establecidas para su obtención.

4.1. Consideraciones generales

Recordando los aspectos planteados en el capítulo 2, en las biopelículas tienen lugar un conjunto de fenómenos interrelacionados entre sí, algunos de los cuales no se conocen con toda exactitud. A pesar de que los métodos estocásticos permiten una descripción más amplia de estos fenómenos que los métodos deterministas, precisan igualmente del establecimiento de un conjunto de consideraciones. Esto se debe a que es necesario lograr un equilibrio entre la complejidad matemática y la correspondencia con la realidad.

El sistema seleccionado fue la *biopelícula*. Para describir su comportamiento se escogió como **variable intensiva** al *espesor*, y como **variable extensiva** el *número total de microorganismos presentes*. El **tamaño** del sistema se caracterizó a través del *área superficial del sólido* sobre el que se desarrolla la biopelícula. Por otra parte, los parámetros externos, asociados con las condiciones ambientales en las que tiene lugar el desarrollo de la biopelícula, se identificaron con variables deterministas. Más aún, estos parámetros se consideraron constantes en el tiempo e iguales para todos los microorganismos de una misma especie, por lo que *sólo se consideran las fluctuaciones internas temporales del espesor*.

Para obtener los modelos matemáticos que se presentan, *se consideró despreciable la influencia de la edad de los microorganismos individuales y de la biopelícula en conjunto*. Aunque es bien conocido que no es exactamente así, esta consideración fue necesaria e inevitable para poder representar a los procesos que tienen lugar como markovianos y aplicar los métodos de modelación estocástica que han sido desarrollados para este tipo de procesos.

Se supuso que los procesos o eventos elementales que tienen lugar en el interior de la biopelícula son: *la reproducción y muerte de los microorganismos, las interacciones entre las especies presentes y el desprendimiento de biomasa por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido*. Estos procesos se consideraron *markovianos de un paso*, ya que fue establecido que los mismos no dependen de la edad de los microorganismos individuales ni de la edad de la biopelícula y, además, el cambio neto en la cantidad total de microorganismos que tiene lugar al ocurrir cualesquiera de estos eventos es un número finito.

Como *muerte* de los microorganismos se estableció el cese de su actividad metabólica, y no incluye la lisis celular que se produce posteriormente. Esto hizo posible suponer que el volumen ocupado por un microorganismo vivo es igual al ocupado por un microorganismo muerto. También *se considera que todos los microorganismos tienen igual volumen, y que éste incluye tanto el volumen ocupado por un microorganismo individual como el de los productos de su actividad metabólica*.

4.2. Caso I: Biopelícula uniespecie sin erosión

4.2.1. Definición de los eventos elementales

En el caso de una biopelícula uniespecie sin desprendimiento de biomasa sólo se consideraron dos eventos elementales: 1) *la reproducción de los microorganismos* y 2) *la muerte o cese de la actividad metabólica de éstos*. Identificando a n_v con el número de microorganismos vivos, n_m con el número de microorganismos muertos y N con el número de microorganismos totales, la reproducción de los microorganismos se expresa como:

$$n_v \xrightarrow{\mu} 2n_v, \quad (4.1)$$

y su muerte:

$$n_v \xrightarrow{b} n_m, \quad (4.2)$$

con la restricción adicional de que, al no considerarse la lisis celular, el número total de microorganismos se conserva, es decir, se cumple:

$$N = n_v + n_m. \quad (4.3)$$

En estas relaciones μ es la tasa de reproducción, conocida comúnmente como *rapidez o velocidad específica de crecimiento o reproducción* y b es la tasa de muerte, conocida como *velocidad específica de muerte o coeficiente de mantenimiento*.

4.2.2. Obtención de la Ecuación Maestra

Recordando los aspectos planteados en el capítulo 3, para obtener la EM es preciso definir matemáticamente las probabilidades de transición por unidad de tiempo correspondientes a los eventos elementales que tienen lugar en el sistema. Suponiendo razonablemente que la probabilidad de que un microorganismo se reproduzca aumenta a medida que el número de microorganismos vivos presentes sea mayor, y que, de forma similar, la probabilidad de que un microorganismo muera se incrementa con el número de microorganismos vivos, se consideró que las probabilidades de transición por unidad de tiempo asociadas a estos eventos son *funciones lineales* del número total de microorganismos vivos. En este caso la probabilidad de transición por unidad de tiempo W_1 de que tenga lugar la reproducción de los microorganismos se expresa como:

$$W_1(n_v, n_m) = \mu n_v, \quad (4.4)$$

y la probabilidad de transición por unidad de tiempo W_2 de que tenga lugar la muerte de los microorganismos:

$$W_2(n_v, n_m) = b n_v. \quad (4.5)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.4) y (4.5) en la EM (3.18) se obtiene la EM correspondiente al caso de una biopelícula uniespecie sin desprendimiento de biomasa:

$$\frac{\partial P(n_v, N; t)}{\partial t} = b(n_v + 1)P(n_v + 1, N; t) + \mu(n_v - 1)P(n_v - 1, N; t) - \mu n_v P(n_v, N; t) - b n_v P(n_v, N; t), \quad (4.6)$$

sujeta a la condición inicial:

$$P(n_v, N; t) = C \delta_{n_v, n_v^0} \delta_{N, N^0} = 1 \text{ para } t = 0, \quad (4.7)$$

donde $P(n_v, N; t)$ denota la probabilidad de tener n_v microorganismos vivos y N microorganismos totales al tiempo t , y C es una constante de normalización.

4.2.3. Solución de la Ecuación Maestra

Debido a que la EM (4.6) es lineal, para su solución se aplicó el método de los momentos. Para determinar el momento M de la distribución de probabilidad

$P(n_v, N; t)$ se multiplica toda la EM por \bar{n}^M y se suma para todas las \bar{n} . El momento M se determina de la ecuación resultante considerando la siguiente relación:

$$\langle \bar{n}^M \rangle_t = \sum_{\bar{n}} \bar{n}^M P(\bar{n}, t), \quad (4.8)$$

donde \bar{n} es un vector definido como:

$$\bar{n} = \begin{bmatrix} n_v \\ N \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

y $\langle \bar{n}^M \rangle_t$ representa el valor esperado de \bar{n}^M .

La aplicación de este método permitió obtener para el comportamiento de los valores esperados $\langle n_v \rangle$ y $\langle N \rangle$ de n_v y N respectivamente:

$$\frac{d\langle n_v \rangle}{dt} = (\mu - b) \langle n_v \rangle, \quad (4.10)$$

$$\frac{d\langle N \rangle}{dt} = \mu \langle n_v \rangle, \quad (4.11)$$

y para las varianzas $\sigma_{n_v}^2$, σ_N^2 y covarianza $\sigma_{n_v} \sigma_N$ de n_v y N :

$$\frac{d\sigma_{n_v}^2}{dt} = 2(\mu - b) \sigma_{n_v}^2 + (\mu + b) \langle n_v \rangle, \quad (4.12)$$

$$\frac{d\sigma_N^2}{dt} = 2\mu \sigma_N^2 + \mu \langle n_v \rangle, \quad (4.13)$$

$$\frac{d\sigma_{n_v} \sigma_N}{dt} = -b \sigma_{n_v} \sigma_N + \mu \langle n_v \rangle, \quad (4.14)$$

donde las relaciones entre las varianzas y covarianzas y los momentos de la distribución de probabilidad $P(n_v, N; t)$ son las siguientes:

$$\sigma_{n_v}^2 = \langle n_v^2 \rangle - \langle n_v \rangle \langle n_v \rangle, \quad (4.15)$$

$$\sigma_N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle \langle N \rangle, \quad (4.16)$$

$$\sigma_{n_v} \sigma_N = \langle n_v N \rangle - \langle n_v \rangle \langle N \rangle. \quad (4.17)$$

Para describir el comportamiento estocástico temporal en función de las variables intensivas fue necesario establecer una correspondencia entre las variables extensivas n_v y N y las variables intensivas E_{act} , que representa el valor del espesor equivalente compuesto por microorganismos vivos, y espesor total E .

La estructura altamente compleja y heterogénea de las biopelículas hace prácticamente imposible describir con toda exactitud la relación entre estas variables, por lo que se consideró que la biopelícula es espacialmente homogénea. Si v_m representa el volumen ocupado por un microorganismo individual y sus productos extracelulares, entonces el volumen V_m ocupado por el conjunto de todos microorganismos y los productos metabólicos que se quedan atrapados en la biopelícula se supone igual a:

$$V_m = v_m N. \quad (4.18)$$

Tomando en cuenta que la porosidad ϵ_b es igual a la fracción en volumen de agua con respecto al volumen total de la biomasa V , y la ecuación (4.18), es fácil encontrar que V se puede calcular como:

$$V = \frac{v_m N}{(1 - \epsilon_b)}. \quad (4.19)$$

A partir de la ecuación (4.19), y recordando que el espesor se puede definir como el volumen total de biomasa presente dividido por el área superficial del sólido A_b , se obtuvo para el espesor activo equivalente E_{act} :

$$E_{act} = \frac{v_m N}{A_b (1 - \epsilon_b)}, \quad (4.20)$$

y para el espesor total E :

$$E = \frac{v_m N}{A_b (1 - \epsilon_b)}. \quad (4.21)$$

Partiendo de las ecuaciones (4.20) y (4.21), se obtienen las siguientes relaciones entre el valor esperado y la varianza de las variables extensivas y de las intensivas correspondientes:

$$\langle E_{act} \rangle = \frac{\langle n_v \rangle}{\beta}, \quad (4.22)$$

$$\langle E \rangle = \frac{\langle N \rangle}{\beta}, \quad (4.23)$$

$$\sigma_{E_{act}}^2 = \frac{\sigma_{n_v}^2}{\beta^2}, \quad (4.24)$$

$$\sigma_E^2 = \frac{\sigma_N^2}{\beta^2}, \quad (4.25)$$

$$\sigma_{E_{act}} \sigma_E = \frac{\sigma_{n_v} \sigma_N}{\beta^2}, \quad (4.26)$$

donde:

$$\beta \equiv \frac{A_b (1 - \epsilon_b)}{v_m}. \quad (4.27)$$

Sustituyendo (4.22) en (4.10), (4.23) en (4.11), (4.24) en (4.12), (4.25) en (4.13) y (4.26) en (4.14) se obtuvieron las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias para el valor esperado y la varianza de las variables intensivas:

$$\frac{d \langle E_{act} \rangle}{dt} = (\mu - b) \langle E_{act} \rangle, \quad (4.28)$$

$$\frac{d \langle E \rangle}{dt} = \mu \langle E_{act} \rangle, \quad (4.29)$$

$$\frac{d \sigma_{E_{act}}^2}{dt} = 2(\mu - b) \sigma_{E_{act}}^2 + \frac{(\mu + b) \langle E_{act} \rangle v_m}{(1 - \epsilon_b) A_b}, \quad (4.30)$$

$$\frac{d \sigma_E^2}{dt} = 2\mu \sigma_E^2 + \frac{\mu \langle E_{act} \rangle v_m}{(1 - \epsilon_b) A_b}, \quad (4.31)$$

$$\frac{d \sigma_{E_{act}} \sigma_E}{dt} = -b \sigma_{E_{act}} \sigma_E + \frac{\mu \langle E_{act} \rangle v_m}{(1 - \epsilon_b) A_b}, \quad (4.32)$$

sujetas a las condiciones iniciales:

$$\langle E_{act} \rangle = \langle E_{act} \rangle_0 \text{ para } t = 0, \quad (4.33)$$

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_0 \text{ para } t = 0, \quad (4.34)$$

$$\sigma_{E_{act}}^2 = 0 \text{ para } t = 0, \quad (4.35)$$

$$\sigma_E^2 = 0 \text{ para } t = 0, \quad (4.36)$$

$$\sigma_{E_{act}} \sigma_E = 0 \text{ para } t = 0. \quad (4.37)$$

Las soluciones de las ecuaciones diferenciales (4.28)-(4.32) representan matemáticamente la evolución en el tiempo del valor esperado y la varianza del espesor activo y espesor total de la biopelícula. En este caso se predicen los siguientes hechos:

1) comportamiento temporal del valor esperado del espesor activo equivalente:

$$\langle E_{act} \rangle_t = E_{act,0} e^{(\mu-b)t}, \quad (4.38)$$

2) comportamiento temporal del valor esperado de espesor total:

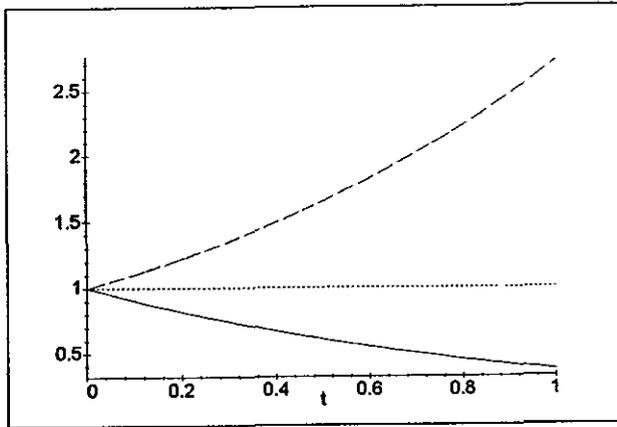


Figura 4.1. $\langle E_{act} \rangle$ vs t predicho, donde:

$[-]$: $(\mu-b)=-1$, $[--]$: $(\mu-b)=0$, $[- -]$: $(\mu-b)=1$

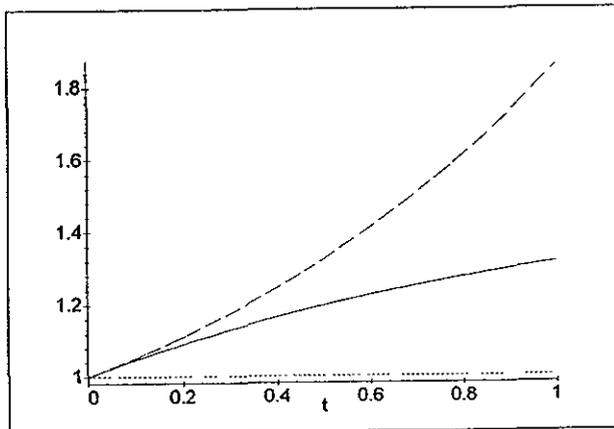


Figura 4.2. $\langle E \rangle$ vs t predicho, donde:

$[-]$: $(\mu-b)=-1$, $[--]$: $(\mu-b)=0$, $[- -]$: $(\mu-b)=1$

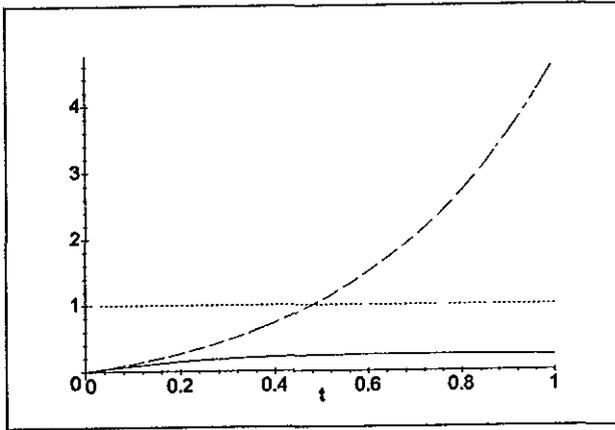


Figura 4.3. $\sigma_{E_{act}}^2$ vs t predicho, donde:

$[-]$: $(\mu-b)=-1$, $[- -]$: $(\mu-b)=0$, $[- \cdot -]$: $(\mu-b)=1$

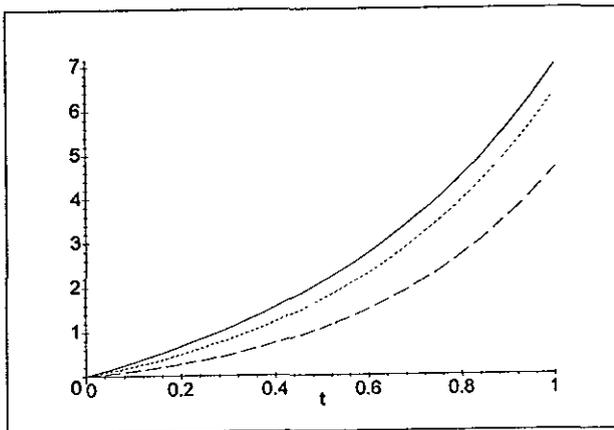


Figura 4.4. σ_E^2 vs t predicho, donde:

$[-]$: $(\mu-b)=-1$, $[- -]$: $(\mu-b)=0$, $[- \cdot -]$: $(\mu-b)=1$

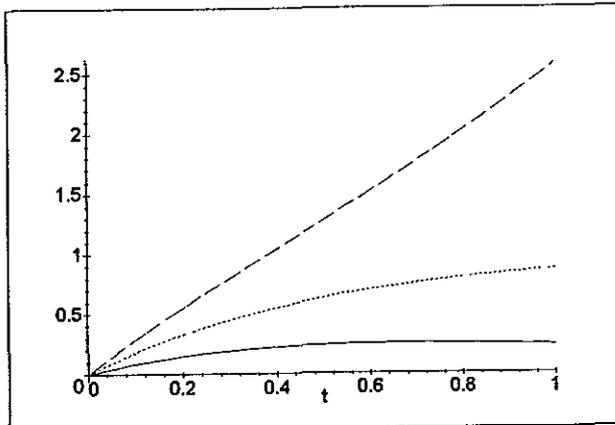


Figura 4.5. $\sigma_{E_{act}} \sigma_E$ vs t predicho, donde:
 [—] : $(\mu-b)=-1$, [· · ·] : $(\mu-b)=0$, [— —] : $(\mu-b)=1$

$$\langle E \rangle_t = E_0 \left(1 - \frac{\mu}{(\mu - b)} + \frac{\mu}{(\mu - b)} e^{(\mu - b)t} \right), \quad (4.39)$$

3) comportamiento temporal de las varianzas y covarianzas:

$$\sigma_{E_{act}}^2 = \frac{(\mu + b) E_{act,0} v_m}{(\mu - b) A_b (1 - \epsilon_b)} \{ e^{2(\mu - b)t} - e^{(\mu - b)t} \}, \quad (4.40)$$

$$\sigma_E^2 = \frac{E_0 v_m}{A_b (1 - \epsilon_b)} \{ e^{2\mu t} - e^{(\mu - b)t} \}, \quad (4.41)$$

$$\sigma_{E_{act}} \sigma_E = - \frac{\mu E_{act,0} v_m}{b A_b (1 - \epsilon_b)} \{ e^{-bt} - e^{(\mu - b)t} \}. \quad (4.42)$$

Los gráficos correspondientes a estos comportamientos, considerando una biopelícula arbitraria con valores E_0 , $E_{act,0}$ y β unitarios, se muestran en las figuras 4.1 a la 4.5.

De acuerdo con los resultados anteriores, obsérvese que en la evolución temporal del espesor activo equivalente E_{act} , predicha por este modelo y que se muestra en la figura 4.1, se pueden distinguir tres situaciones diferentes. Cuando la tasa de reproducción μ es mayor que la tasa de muerte b , E_{act} aumenta con el tiempo. En cambio, cuando μ es igual a b , E_{act} tiende a tomar un valor constante en el tiempo, mientras que disminuye cuando μ es menor que b . Estos comportamientos son razonables si se recuerda que las tasas de reproducción y muerte son una medida de las velocidades a las que ocurren estos procesos.

Con respecto a las fluctuaciones internas temporales que se presentan en el espesor activo, mostradas en la figura 4.3 y medidas a través de la varianza $\sigma_{E_{act}}^2$, se puede apreciar que las mismas se incrementan con el tiempo, y por tanto afectan el comportamiento del espesor cuando μ es mayor que b , mientras que tienden a tomar un valor constante para las otras situaciones, donde se predice que su influencia es mucho menor.

Obsérvese que la evolución temporal del espesor de biopelícula E cuando μ es mayor que b , representado en la figura 4.2, se corresponde cualitativamente con la fase de crecimiento exponencial de evolución de la biopelícula experimentalmente observado y mostrado en la figura 2.1. Sin embargo, el modelo predice que el espesor se incrementa indefinidamente en el tiempo y que nunca se alcanza el estado estacionario, lo que no se corresponde con los hechos observados. Esto se debe a que no se consideró el desprendimiento de biomasa por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido, que es uno de los procesos más importantes a tomar en cuenta en estos sistemas.

Por otra parte, aunque generalmente la tasa de reproducción es mucho mayor que la tasa de muerte, existen situaciones en que esto no es así, como por ejemplo, cuando en el medio existen sustancias tóxicas o la concentración de sustrato es insuficiente. Estas situaciones han sido analizadas, en particular, cuando se estudia

la acción de los biocidas en las biopelículas [46]-[48]. En este caso se ha observado una disminución significativa del espesor [47], la que no es predicha en el modelo propuesto, tal y como se aprecia en la figura 4.2 cuando μ es menor o igual que b . Esto se debe a la no consideración del desprendimiento de biomasa por erosión ni de la lisis celular que ocurre posterior a la muerte de los microorganismos.

En la figura 4.4 se aprecia que las fluctuaciones temporales que se producen en el espesor de biopelícula E , representadas por la varianza de éste, σ_E^2 , tienden a aumentar indefinidamente en el tiempo. **De aquí que, de acuerdo con este modelo, para una biopelícula uniespecie sin desprendimiento de biomasa o en la fase de crecimiento exponencial, estas fluctuaciones juegan un papel importante en el comportamiento del espesor y, por tanto, en los procesos relacionados con biopelículas, por lo que las mismas no deben ser despreciadas.** Esta predicción es importante ya que estas fluctuaciones pueden originar inestabilidades en el comportamiento de las biopelículas, las que podrían disminuir la acción de los biocidas en aquellos procesos donde éstas resultan indeseables, como se sugiere en la referencia [46], o pueden prolongar la fase de puesta en marcha de los filtros percoladores, como se verá posteriormente en el capítulo 5.

Es importante señalar que *las soluciones obtenidas describen parcialmente el comportamiento estocástico de una biopelícula uniespecie sin desprendimiento.* Esto se debe a que sólo se determinaron los dos primeros momentos de la distribución de probabilidad correspondiente, ya que permiten estimar la magnitud de las fluctuaciones y son los que usualmente se observan experimentalmente. El valor esperado y la varianza permiten describir totalmente el sistema cuando se conoce que la distribución de probabilidad asociada es normal o gaussiana. En este caso no existen bases para establecer esta consideración para todas las situaciones que se puedan presentar, salvo en aquellas en que se observa que el espesor toma un valor constante en el tiempo.

4.3. Caso II: Biopelícula uniespecie con erosión

4.3.1. Definición de los eventos elementales

En el caso de una biopelícula uniespecie con erosión de biomasa tienen lugar cuatro eventos elementales específicos: 1) *reproducción de los microorganismos*, 2) *muerte de los microorganismos*, 3) *desprendimiento por erosión de los microorganismos vivos* y 4) *desprendimiento por erosión de los microorganismos muertos*. Estos eventos se representan de la siguiente forma. La reproducción de los microorganismos se expresa como:

$$n_v \xrightarrow{\mu} 2n_v, \quad (4.43)$$

y su muerte:

$$n_v \xrightarrow{b} n_m, \quad (4.44)$$

mientras que el desprendimiento de microorganismos vivos se representa como:

$$2n_v \xrightarrow{\frac{K_d}{A_b}} \gamma, \quad (4.45)$$

y el desprendimiento de los microorganismos muertos:

$$2n_m \xrightarrow{\frac{K_d}{A_b}} \gamma. \quad (4.46)$$

Adicionalmente se cumple que el número total de microorganismos se conserva, de tal forma que:

$$N = n_v + n_m. \quad (4.47)$$

En las expresiones (4.45) y (4.46) K_d representa la *constante específica de velocidad de desprendimiento*, referida al número de microorganismos y A_b el área superficial del sólido sobre el que se desarrolla la biopelícula.

4.3.2. Obtención de la Ecuación Maestra

Para obtener las probabilidades de transición en la unidad de tiempo se supuso, al igual que en el caso anterior, que estas cantidades son *funciones lineales* del número de microorganismos vivos para los eventos de reproducción y muerte, de tal forma que la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que tenga lugar la reproducción de los microorganismos es:

$$W_1(n_v, n_m) = \mu n_v \quad (4.48)$$

y la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que tenga lugar la muerte de los microorganismos está dada por:

$$W_2(n_v, n_m) = b n_v. \quad (4.49)$$

Tomando en cuenta que, como es razonable suponer, la probabilidad de que un microorganismo se desprenda es proporcional al número de microorganismos y el hecho demostrado experimentalmente de que la constante de velocidad a la que este proceso tiene lugar también es proporcional al número de microorganismos pero inversamente proporcional al área A_b ocupada por la biomasa [32, 33], para los eventos relacionados con la erosión de la biopelícula se supuso que las probabilidades de transición en la unidad de tiempo asociada a cada evento son *funciones cuadráticas* del número de microorganismos presentes y que son inversamente proporcionales al área A_b , de tal forma que la probabilidad de transición por unidad

de tiempo de que tenga lugar el desprendimiento de los microorganismos vivos se puede representar por:

$$W_3(n_v, n_m) = \left(\frac{K_d}{A_b} \right) n_v^2, \quad (4.50)$$

y la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que tenga lugar el desprendimiento de microorganismos muertos es:

$$W_4(n_v, n_m) = \left(\frac{K_d}{A_b} \right) n_m^2. \quad (4.51)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.48)-(4.51) en la ecuación maestra (3.18), se obtiene la **EM** correspondiente al caso de una biopelícula uniespecie con erosión,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(n_v, N; t)}{\partial t} = & \mu(n_v - 1) P(n_v - 1, N - 1; t) \\ & + b(n_v + 1) P(n_v + 1, N; t) \\ & + \frac{K_d}{A_b} (n_v + 2)^2 P(n_v + 2, N + 2; t) \\ & + \frac{K_d}{A_b} (N - n_v + 2)^2 P(n_v, N + 2; t) \\ & - \mu n_v P(n_v, N; t) - b n_v P(n_v, N; t) \\ & - \frac{K_d}{A_b} n_v^2 P(n_v, N; t) - \frac{K_d}{A_b} (N - n_v)^2 P(n_v, N; t), \quad (4.52) \end{aligned}$$

sujeta a la condición inicial:

$$P(n_v, N; t) = C \delta_{n_v, n_v^0} \delta_{N, N^0} = 1 \text{ para } t = 0, \quad (4.53)$$

donde C es una constante de normalización.

4.3.3. Solución de la Ecuación Maestra

Puede observarse fácilmente que la **EM** (4.52) es una ecuación **no lineal**. Para su solución se empleó el método de desarrollo en Ω con aproximación lineal al ruido. Las variables intensivas consideradas fueron el espesor activo equivalente E_{act} y el espesor total de biopelícula E , mientras que las variables extensivas seleccionadas fueron el número de microorganismos vivos n_v y el número de microorganismos totales N . Las relaciones entre estas variables corresponden a las ecuaciones (4.20) y (4.21). El parámetro Ω elegido para aplicar el método de desarrollo de van Kampen se define como:

$$\Omega \equiv \frac{A_b(1 - \epsilon_b)}{v_m}. \quad (4.54)$$

Las relaciones entre las variables intensivas y las extensivas se definieron de acuerdo a los principios establecidos en este método y presentados en el capítulo 3, de tal forma que:

$$n_v = \Omega E_{act} + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta_{act}, \quad (4.55)$$

$$N = \Omega E + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta, \quad (4.56)$$

donde ζ_{act} y ζ representan las fluctuaciones que se producen alrededor de las variables intensivas E_{act} y E respectivamente producto de los eventos internos de reproducción de los microorganismos y desprendimiento de biomasa que tienen lugar en la biopelícula.

La aplicación del método de desarrollo en Ω con aproximación lineal al ruido permitió obtener las siguientes ecuaciones diferenciales que representan la evolución temporal del valor esperado, varianza y covarianza del espesor activo equivalente y del espesor total:

$$\frac{d\langle E_{act} \rangle}{dt} = (\mu - b) \langle E_{act} \rangle - 2K_d' \langle E_{act} \rangle^2, \quad (4.57)$$

$$\frac{d\langle E \rangle}{dt} = \mu \langle E_{act} \rangle - 2K_d' \langle E_{act} \rangle^2 - 2K_d' (\langle E \rangle - \langle E_{act} \rangle)^2, \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{E_{act}}^2}{dt} &= 2(\mu - b - 4K_d' \langle E_{act} \rangle) \sigma_{E_{act}}^2 + \frac{(\mu + b)}{\Omega} \langle E_{act} \rangle \\ &\quad + \frac{4K_d'}{\Omega} \langle E_{act} \rangle^2, \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_E^2}{dt} &= 2(\mu - 4K_d' \langle E_{act} \rangle) \sigma_E^2 + \frac{\mu}{\Omega} \langle E_{act} \rangle \\ &\quad + \frac{4K_d'}{\Omega} \langle E_{act} \rangle^2 + \frac{4K_d'}{\Omega} (\langle E \rangle - \langle E_{act} \rangle)^2, \end{aligned} \quad (4.60)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{E_{act} \sigma_E}}{dt} &= (2\mu - b - 8K_d' \langle E_{act} \rangle) \sigma_{E_{act} \sigma_E} \\ &\quad + \frac{\mu}{\Omega} \langle E_{act} \rangle + \frac{4K_d'}{\Omega} \langle E_{act} \rangle^2, \end{aligned} \quad (4.61)$$

sujetas a las condiciones iniciales:

$$\langle E_{act} \rangle = \langle E_{act} \rangle_0 \text{ para } t = 0, \quad (4.62)$$

$$\langle E \rangle = \langle E \rangle_0 \text{ para } t = 0, \quad (4.63)$$

$$\sigma_{E_{act}}^2 = 0 \text{ para } t = 0, \quad (4.64)$$

$$\sigma_E^2 = 0 \text{ para } t = 0, \quad (4.65)$$

$$\sigma_{E_{act}} \sigma_E = 0 \text{ para } t = 0. \quad (4.66)$$

El comportamiento estocástico del espesor de estado estacionario se determina igualando a cero el término correspondiente al operador diferencial temporal de las ecuaciones (4.57)-(4.61). En este caso se obtuvo:

$$\langle E_{act} \rangle_s = \frac{(\mu - b)}{2K'_d}, \quad (4.67)$$

$$\langle E \rangle_s = \sqrt{\frac{b(\mu - b)}{4K'_d{}^2} + \frac{(\mu - b)}{2K'_d}}, \quad (4.68)$$

$$\sigma_{E_{act},s}^2 = \frac{\{(\mu + b) \langle E_{act} \rangle_s + 4K'_d \langle E_{act} \rangle_s^2\} v_m}{2A_b(1 - \epsilon_b) \{4K'_d \langle E_{act} \rangle_s - (\mu - b)\}}, \quad (4.69)$$

$$\sigma_E^2 = \frac{(4K'_d \langle E_{act} \rangle_s^2 + 4K'_d (\langle E \rangle_s - \langle E_{act} \rangle_s)^2 + \mu \langle E_{act} \rangle_s) v_m}{2A_b(1 - \epsilon_b) \{4K'_d \langle E_{act} \rangle_s - \mu\}}, \quad (4.70)$$

$$\sigma_{E_{act}} \sigma_E = \frac{\{\mu \langle E_{act} \rangle_s + 4K'_d \langle E_{act} \rangle_s^2\} v_m}{A_b(1 - \epsilon_b) \{8K'_d \langle E_{act} \rangle_s + b - 2\mu\}}, \quad (4.71)$$

donde K'_d representa la constante específica de velocidad de reproducción referida al espesor de la biopelícula, cumpliéndose que:

$$K'_d = K_d \frac{(1 - \epsilon_b)}{v_m}. \quad (4.72)$$

Es importante destacar que las ecuaciones (4.67)-(4.71) describen completamente el comportamiento estocástico de una biopelícula uniespecie con desprendimiento de biomasa debido a la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido, cuando la misma se encuentra en la fase de estado estacionario de su evolución temporal. Esto se debe a que en estado estacionario la función de distribución de probabilidad es normal o gaussiana, por lo que basta la definición de sus dos primeros momentos para representarla.

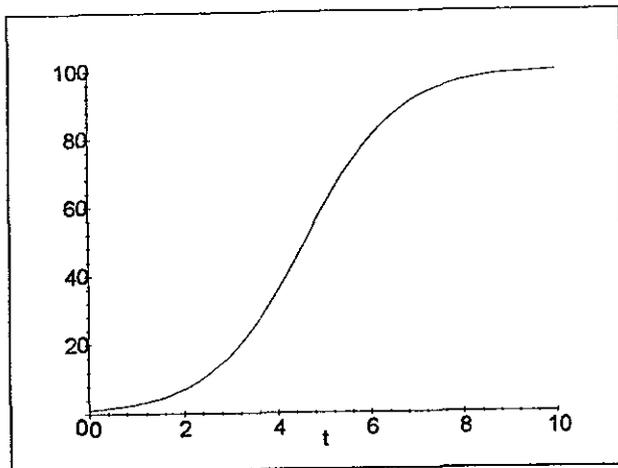


Figura 4.6. $\langle E \rangle$ vs. t para una biopelícula arbitraria

Considerando que la tasa de muerte es mucho menor que la tasa de reproducción, la solución de la ecuación (4.58), sujeta a la condición inicial (4.63), tiene la forma:

$$\langle E \rangle = \frac{\mu E_0}{2K_d E_0 + (\mu - 2K_d E_0) e^{-\mu t}}, \quad (4.73)$$

la que representa la evolución temporal del valor esperado de espesor para una biopelícula uniespecie con erosión y totalmente activa. Este comportamiento se muestra en la figura 4.6 considerando una biopelícula arbitraria con $E_0 = 1 \mu m$, $\mu = 1 d^{-1}$, $K_d = 0.01 d^{-1} \mu m^{-1}$ y $b \ll \mu$.

Si se compara cualitativamente el comportamiento predicho en la figura 4.6 con el observado experimentalmente y mostrado en la figura 2.1, se aprecia que el modelo propuesto sólo describe las fases de crecimiento exponencial y de estado estacionario en la evolución temporal de las biopelículas. Esto se debe a que no se consideraron los fenómenos de deposición y atrapamiento de los microorganismos que juegan un papel fundamental en la primeras etapas de formación de la biopelícula, por lo que no se puede describir la fase de retardo. Tampoco se consideró la influencia de la edad de la biopelícula en los procesos internos que tienen lugar en la biomasa, ni otros fenómenos relacionados con el metabolismo anaerobio que se presenta bajo determinadas condiciones, por lo que el modelo no puede describir la fase de desprendimiento.

Resulta conveniente establecer una correspondencia entre el valor esperado y la varianza del espesor y las variables experimentales que se miden usualmente en estos sistemas. En el caso del valor esperado esta correspondencia es obvia. Con respecto a la varianza, se puede suponer que la misma se relaciona con la rugosidad R_a de la biopelícula de acuerdo a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} R_a &= \sqrt{\sigma_E^2} \\ &= \sqrt{\frac{\{(\mu + b) \langle E_{act} \rangle_s + 4K_d \langle E_{act} \rangle_s^2\} v_m}{2A_b (1 - \epsilon_b) \{4K_d \langle E_{act} \rangle_s - (\mu - b)\}}} \end{aligned} \quad (4.74)$$

La ecuación (4.74) no se estableció de manera arbitraria, sino que fueron tomados en cuenta los siguientes hechos. Por definición, la varianza es una medida de las fluctuaciones, ya que su raíz cuadrada es igual a la desviación típica. Por otra parte, la rugosidad se identifica con la desviación típica de los valores de espesor medidos experimentalmente a una distancia tal que no exista correlación espacial entre éstos [78, 80]. Si se asume que la evolución temporal de las biopelículas es un proceso **ergódico**, los promedios temporales medidos en una misma muestra son iguales a los obtenidos cuando se observan un conjunto de muestras independientes.

Al respecto, la ecuación (4.74) predice que la rugosidad toma un valor muy pequeño y prácticamente despreciable cuando el tamaño del sistema es muy grande en comparación con el tamaño de los microorganismos, lo que es de esperar si se recuerda que la misma se relaciona en este contexto con las fluctuaciones internas. Esto se corresponde con el hecho experimentalmente demostrado de que la rugosidad sólo se puede calcular cuando se miden valores *puntuales* de espesor, donde matemáticamente el área superficial del sólido correspondiente al sistema observado tiende a cero y físicamente significa que el área observada y el área ocupada por un microorganismo individual son del mismo orden [80].

4.4. Caso III: Biopelícula multiespecie

4.4.1. Definición de los eventos elementales

Para el caso de una biopelícula multiespecie con desprendimiento de biomasa por erosión se consideraron los siguientes eventos elementales: 1) *la reproducción de los microorganismos de cada una de las especies presentes*, 2) *las interacciones presa - depredador que tienen lugar entre las especies*, 3) *la muerte de los microorganismos*, 4) *el desprendimiento por erosión de los microorganismos vivos* y 5) *el desprendimiento por erosión de los microorganismos muertos*. Así, la reproducción de los microorganismos pertenecientes a las especies que no interaccionan o interaccionan indirectamente se representa como:



$$i = 1 \dots N, \quad (4.76)$$

donde N representa el número de especies, X_i el número de microorganismos de la especie i , y μ_1^i la tasa de crecimiento de los microorganismos de la especie i ; la reproducción de los microorganismos presas y depredadores es:



$$j = 1 \dots M, \quad (4.79)$$

donde M representa al número de interacciones presa - depredador que se tienen lugar en la biopelícula, Y_j es el número de microorganismos presas y Z_j el número de microorganismos depredadores que participan en la j interacción; la muerte de los microorganismos se describe como:

$$X_i \xrightarrow{b_1^i} U, \quad (4.80)$$

$$Y_j \xrightarrow{b_2^j} U, \quad (4.81)$$

$$Z_j \xrightarrow{b_3^j} U, \quad (4.82)$$

donde U representa al número de microorganismos muertos y b_1^i , b_2^j y b_3^j representan las tasas de muerte para cada especie de microorganismo presente en la biopelícula, y el desprendimiento por erosión de los microorganismos vivos y muertos se representa:

$$2X_i \xrightarrow{\frac{K_d}{\Omega}} \gamma, \quad (4.83)$$

$$2Y_j \xrightarrow{\frac{K_d}{\Omega}} \gamma, \quad (4.84)$$

$$2Z_j \xrightarrow{\frac{K_d}{\Omega}} \gamma, \quad (4.85)$$

$$2U \xrightarrow{\frac{K_d}{\Omega}} \gamma, \quad (4.86)$$

donde K_d representa la constante de velocidad específica de desprendimiento de biomasa referida al espesor de la biopelícula, la que se supuso igual para todos los microorganismos presentes, y Ω se determina por:

$$\Omega \equiv \frac{A_b(1 - \epsilon_b)}{v_m}. \quad (4.87)$$

El número total de microorganismos L se conserva, por lo que se cumple:

$$L = \sum_{i=1}^N X_i + \sum_{j=1}^M (Y_j + Z_j) + U. \quad (4.88)$$

Obsérvese en este caso que el número total de eventos elementales que tienen lugar en esta biopelícula depende del número de especies presentes y de interacciones presa-depredador entre éstas, y será igual a $3N + 6M + 1$.

4.4.2. Obtención de la Ecuación Maestra

De acuerdo con los eventos elementales definidos para este caso, se supusieron las siguientes relaciones que describen las probabilidades de transición en la unidad de tiempo W asociadas a cada uno de los eventos definidos. Similar a los casos anteriores, para la reproducción de los microorganismos pertenecientes a las especies que no interaccionan o interaccionan indirectamente la probabilidad de transición por unidad de tiempo es:

$$W_{i,r} = \mu_1^i X_i, \quad (4.89)$$

y para la reproducción de los microorganismos pertenecientes a las especies que son empleadas como fuente de alimento por los depredadores:

$$W_{1,j,r} = \mu_2^j Y_j. \quad (4.90)$$

Suponiendo razonablemente que la probabilidad de que un microorganismo predador se reproduzca es proporcional tanto a la cantidad total de éstos, como a la cantidad de microorganismos que le sirven de alimento, y considerando que esta probabilidad disminuye a medida que el tamaño del sistema es mayor, la probabilidad de transición por unidad de tiempo asociada a la reproducción de los microorganismos depredadores se describe por la relación:

$$W_{2,j,r} = \frac{\mu_3^j}{\Omega} Y_j Z_j. \quad (4.91)$$

Al igual que en los casos anteriores, la probabilidad de transición por unidad de tiempo asociada a la muerte de los microorganismos se estableció de tal forma que:

$$W_{i,m} = b_1^i X_i, \quad (4.92)$$

$$W_{1,j,m} = b_2^j Y_j, \quad (4.93)$$

$$W_{2,j,m} = b_3^j Z_j, \quad (4.94)$$

mientras que para el desprendimiento de biomasa causado por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido se supone:

$$W_{i,d} = \frac{K_d}{\Omega} X_i^2, \quad (4.95)$$

$$W_{1,j,d} = \frac{K_d}{\Omega} Y_j^2, \quad (4.96)$$

$$W_{2,j,d} = \frac{K_d}{\Omega} Z_j^2, \quad (4.97)$$

$$W_{u,d} = \frac{K_d}{\Omega} U^2. \quad (4.98)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.89)-(4.98) en la ecuación (3.18) se obtiene la EM para una biopelícula multiespecie con desprendimiento de biomasa por erosión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & \sum_{i=1}^N (\check{E}_{X_i}^{-1} \check{E}_L^{-1} - 1) \mu_1^i X_i P + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Y_j}^{-1} \check{E}_L^{-1} - 1) \mu_2^j Y_j P \\ & + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Y_j}^{+1} \check{E}_{Z_j}^{-1} - 1) \frac{\mu_3^j}{\Omega} Y_j Z_j P + \sum_{i=1}^N (\check{E}_{X_i}^{+1} - 1) b_1^i X_i P \\ & + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Y_j}^{+1} - 1) b_2^j Y_j P + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Z_j}^{+1} - 1) b_3^j Z_j P \\ & + \sum_{i=1}^N (\check{E}_{X_i}^{+2} \check{E}_L^{+2} - 1) \frac{K_d}{\Omega} X_i^2 P + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Y_j}^{+2} \check{E}_L^{+2} - 1) \frac{K_d}{\Omega} Y_j^2 P \\ & + \sum_{j=1}^M (\check{E}_{Z_j}^{+2} \check{E}_L^{+2} - 1) \frac{K_d}{\Omega} Z_j^2 P \\ & + (\check{E}_L^{+2} - 1) \left(L - \sum_{i=1}^N X_i - \sum_{j=1}^M (Y_j + Z_j) \right)^2 P, \end{aligned} \quad (4.99)$$

sujeta a la condición inicial:

$$P = C \delta_{x_1, x_1^0} \dots \delta_{x_n, x_n^0} \delta_{Y_1, Y_1^0} \dots \delta_{Y_m, Y_m^0} \delta_{z_1, z_1^0} \dots \delta_{z_m, z_m^0} \delta_{L, L^0} = 1 \text{ para } t = 0, \quad (4.100)$$

donde C es una constante de normalización y P representa la función de probabilidad conjunta definida como:

$$P = P(X_1, \dots, X_n, Y_1, \dots, Y_m, Z_1, \dots, Z_m, L; t). \quad (4.101)$$

En la ecuación (4.99) el operador \check{E} es el operador de ascenso definido por:

$$\check{E}_x^a [F(x)] = F(x + a), \quad (4.102)$$

donde F es una función arbitraria de la variable "discreta" x y a representa el cambio en x .

4.4.3. Solución de la Ecuación Maestra

La EM (4.99) es una ecuación no lineal, por lo que para su solución se aplicó el método de desarrollo en Ω con aproximación lineal al ruido. Como variables intensivas fueron seleccionadas los espesores de biomasa equivalente de cada especie de microorganismos x_i , y_j , z_j y el espesor total de biopelícula E . El parámetro Ω se define de acuerdo a la ecuación (4.87). Las relaciones entre las variables intensivas, las extensivas y las fluctuaciones son las siguientes:

$$X_i = \Omega x_i + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta_{x_i}, \quad (4.103)$$

$$Y_j = \Omega y_j + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta_{y_j}, \quad (4.104)$$

$$Z_j = \Omega z_j + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta_{z_j}, \quad (4.105)$$

$$L = \Omega E + \Omega^{\frac{1}{2}} \zeta_E, \quad (4.106)$$

donde ζ representa las fluctuaciones alrededor de la correspondiente variable intensiva, especificada como subíndice.

De acuerdo con este modelo, los valores esperados de estado estacionario de las variables intensivas son:

$$\langle x_i \rangle_s = \frac{(\mu_1^i - b_1^i)}{2K_d}, \quad (4.107)$$

$$\langle z_j \rangle_s = \frac{\left\{ \frac{\mu_3^j (\mu_2^j - b_2^j)}{4K_d^2} - \frac{b_2^j}{2K_d} \right\}}{\left\{ 1 + \frac{(\mu_3^j)^2}{4K_d^2} \right\}}, \quad (4.108)$$

$$\langle y_j \rangle_s = \frac{(\mu_2^j - b_2^j)}{2K_d} - \frac{\mu_3^j}{2K_d} \langle z_j \rangle_s, \quad (4.109)$$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_s = & \left\{ \frac{1}{2K_d} \left\{ \sum_{i=1}^N (\mu_1^i \langle x_i \rangle_s - 2K_d \langle x_i \rangle_s^2) + \sum_{j=1}^M \Psi_j \right\} \right\}^{\frac{1}{2}} \\ & + \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle_s + \sum_{j=1}^M \langle y_j \rangle_s + \sum_{j=1}^M \langle z_j \rangle_s, \end{aligned} \quad (4.110)$$

donde:

$$\Psi_j \equiv \mu_2^j \langle y_j \rangle_s - 2K_d (\langle y_j \rangle_s^2 + \langle z_j \rangle_s^2). \quad (4.111)$$

Las varianzas y covarianzas de estado estacionario de las variables intensivas se determinan como:

$$\sigma_{x_i,s}^2 = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{2}\right) \frac{\{(\mu_1^i + b_1^i) \langle x_i \rangle_s + 4K_d \langle x_i \rangle_s^2\}}{\{4K_d \langle x_i \rangle_s + b_1^i - \mu_1^i\}}, \quad (4.112)$$

$$\sigma_{y_j,s}^2 = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{4}\right) \frac{\{(\mu_2^j + b_2^j) \langle y_j \rangle_s + \mu_3^j \langle y_j \rangle_s + 4K_d \langle y_j \rangle_s^2\}}{\{4K_d \langle y_j \rangle_s + \mu_3^j (\langle y_j \rangle_s + \langle z_j \rangle_s) + b_2^j - \mu_2^j\}}, \quad (4.113)$$

$$\sigma_{z_j,s}^2 = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{2}\right) \frac{\{\mu_3^j \langle z_j \rangle_s \langle y_j \rangle_s + b_3^j \langle z_j \rangle_s + 4K_d \langle z_j \rangle_s^2\}}{\{4K_d \langle z_j \rangle_s + b_3^j - \mu_3^j (\langle y_j \rangle_s + \langle z_j \rangle_s)\}}, \quad (4.114)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{E,s}^2 &= \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{2\omega}\right) \left\{ \sum_{i=1}^N (\mu_1^i \langle x_i \rangle_s + 4K_d \langle x_i \rangle_s) \right\} \\ &+ \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{2\omega}\right) \left\{ \sum_{j=1}^M (\mu_2^j \langle y_j \rangle_s + 4K_d (\langle y_j \rangle_s^2 + \langle z_j \rangle_s^2)) \right\} \\ &+ \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{2\omega}\right) \left\{ 4K_d \left(\langle E \rangle_s - \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle_s - \sum_{j=1}^M (\langle y_j \rangle_s + \langle z_j \rangle_s) \right)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.115)$$

$$\sigma_{x_i} \sigma_{E,s} = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{\omega}\right) \{2\mu_1^i \langle x_i \rangle_s + 8K_d \langle x_i \rangle_s^2\}, \quad (4.116)$$

$$\sigma_{y_j} \sigma_{E,s} = \left(\frac{1}{\Omega}\right) \left(\frac{1}{\omega}\right) \{2\mu_2^j \langle y_j \rangle_s + 8K_d \langle y_j \rangle_s^2\}, \quad (4.117)$$

$$\sigma_{x_i} \sigma_{x_l,s} = 0 \quad (i = 1..N, l = 1..N, i \neq l), \quad (4.118)$$

$$\sigma_{y_j} \sigma_{y_l,s} = 0 \quad (j = 1..M, l = 1..M, i \neq l), \quad (4.119)$$

$$\sigma_{z_j} \sigma_{z_l,s} = 0 \quad (j = 1..M, l = 1..M, j \neq l), \quad (4.120)$$

$$\sigma_{x_i} \sigma_{y_j,s} = 0 \quad (i = 1..N, j = 1..M), \quad (4.121)$$

$$\sigma_{x_i} \sigma_{z_j,s} = 0 \quad (i = 1..N, j = 1..M), \quad (4.122)$$

$$\sigma_{y_j} \sigma_{z_l,s} = 0 \quad (j = 1..M, l = 1..M), \quad (4.123)$$

$$\sigma_{z_j} \sigma_{E,s} = 0, \quad (4.124)$$

donde ω se define como:

$$\begin{aligned} \omega \equiv & \sum_{i=1}^N (4K_d \langle x_i \rangle_s - \mu_1^i) + \sum_{j=1}^M (4K_d \langle z_j \rangle_s + 4K_d \langle y_j \rangle_s - \mu_2^j) \\ & + 4K_d (1 - N - 2M) \left(\langle E \rangle_s - \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle_s - \sum_{j=1}^M (\langle y_j \rangle_s + \langle z_j \rangle_s) \right) \end{aligned} \quad (4.125)$$

Las ecuaciones (4.107)-(4.124) describen completamente el comportamiento estocástico en la fase de estado estacionario correspondiente a la evolución temporal de una biopelícula multiespecie con desprendimiento de biomasa debido a la erosión provocada por el esfuerzo de corte del fluido. Esta afirmación se basa en el conocimiento de que en estado estacionario o de equilibrio la función de distribución de probabilidad de las fluctuaciones es normal o gaussiana, por lo que basta especificar sus dos primeros momentos para definirla.

Obsérvese que este modelo se reduce al obtenido para el caso de una biopelícula uniespecie con erosión cuando se considera que sólo existe una especie de microorganismo. Por otra parte, conviene mencionar que, aunque éste representa una forma más realista de describir las biopelículas que se desarrollan en los filtros percoladores, existen dos aspectos prácticos a considerar. En primer lugar, obsérvese que éste es mucho más complejo desde el punto de vista matemático que el modelo obtenido para el caso II. En segundo lugar, es muy difícil establecer con exactitud el número de especies presentes en estos sistemas, el que además puede ser bastante alto, así como las interacciones existentes entre éstas [65].

5. Teoría vs. experimento

5.1. Introducción

En el capítulo 4 fueron presentados un conjunto de modelos que permiten describir desde el punto de vista **mesoscópico** el comportamiento temporal del espesor de biopelícula, considerando tres casos específicos: *biopelícula uniespecie sin desprendimiento*, *biopelícula uniespecie con erosión* y *biopelícula multiespecie con erosión*. Estos modelos no solamente predicen el comportamiento temporal del valor esperado del espesor, sino también las fluctuaciones internas temporales que se producen alrededor de esta variable.

Por otra parte, la determinación de la variabilidad espacial y temporal del espesor producto de los procesos internos de crecimiento y desprendimiento de la biomasa requiere del empleo de métodos de medición no destructivos y de alta precisión que permitan realizar mediciones puntuales de espesor [49, 52, 53]. Aunque en la bibliografía consultada se encontraron algunos trabajos relacionados con el estudio experimental de esta variabilidad [53, 55], [78]-[80], en sólo dos se reportaron mediciones cuantitativas [78, 80], ya que en los restantes los autores se limitan a la descripción cualitativa de los hechos observados. Esto se puede atribuir a la aparición relativamente reciente y el alto costo de los métodos experimentales requeridos. Por otra parte, en los trabajos seleccionados los autores no reportaron con exactitud los datos experimentales relacionados con las condiciones en que tuvo lugar el desarrollo de la biopelícula, por lo que no se pudo comparar los resultados teóricos y experimentales relacionados con el comportamiento del valor esperado del espesor.

En principio las fluctuaciones internas temporales pueden ser determinadas experimentalmente de dos formas diferentes. Una consiste en la observación de una muestra de biopelícula durante un largo intervalo de tiempo. La otra forma consiste en la observación de muchas muestras de biopelículas independientes. Ambas metodologías deben arrojar el mismo resultado si el proceso es **ergódico**. Debido a que los procedimientos experimentales que se emplean en la actualidad se basan en la observación de muestras independientes, para poder realizar la comparación entre los resultados teóricos y experimentales *se supuso que la evolución temporal del espesor de biopelícula es un proceso ergódico*.

En este capítulo se comparan los resultados teóricos con los resultados observados por Murga y colaboradores (1995) [78] y Peyton (1996) [80] con el propósito de analizar el alcance y las limitaciones de los modelos propuestos.

5.2. Teoría vs los datos obtenidos por Murga y colaboradores

5.2.1. Procedimiento experimental

En 1995 Murga, Stewart y Don Daly realizaron mediciones experimentales de espesor para tres tipos de biopelícula: una formada por la especie *Pseudomonas aeruginosa*, otra formada por la especie *Klebsiella pneumoniae* y una tercera formada por ambas especies de microorganismos [78]. Las características generales de estas especies y las biopelículas que forman se muestran en la tabla 5.1.

Tabla 5.1. Características de las biopelículas formadas por *K. pneumoniae* y *P. aeruginosa*

| Población | <i>K. pneumoniae</i> | <i>P. aeruginosa</i> | <i>binaria</i> |
|--|----------------------|----------------------|----------------|
| forma | cilíndrica | cilíndrica | cilíndrica |
| volumen [μm^3] | 2.09 | 0.91 | 1.5 |
| $\mu_{\text{máx}}$ [h^{-1}] | 2 | 0.4 | - |
| ϵ_b [-] | 0.90 | 0.76 | 0.83 |

El objetivo de su trabajo consistió en la medición de la rugosidad de cada una de estas biopelículas, ya que desde el punto de vista ingenieril esto constituye uno de los primeros pasos para analizar experimentalmente la influencia o no influencia de esta variable en los procesos relacionados con biopelículas.

Para realizar las mediciones fueron recolectadas biopelículas en la fase de estado estacionario desarrolladas en un reactor anular de flujo continuo. Posteriormente, las mismas fueron sometidas a un proceso de crioempotramiento y crio-seccionamiento para obtener muestras de 1 a 2 cm de longitud y 5 μm de ancho.

Las imágenes de la sección transversal de cada una de las muestras fueron tomadas con un analizador de imágenes (American Innovision Viodemetric 150) basado en un microscopio Olympus BH-2 con transmisión de luz y una cámara fotográfica modelo N PVM-1342Q, Sony Corp. Para aumentar la precisión de las mediciones, las imágenes fueron almacenadas en una computadora con amplificación 200x a 400x. Éstas fueron posteriormente concatenadas para obtener perfiles de espesor de 4 a 15 mm de longitud. Las mediciones de espesor para construir el perfil fueron efectuadas cada 2 μm .

La rugosidad $R_{a,ex}$, se identificó con la desviación típica de los valores experimentales de espesor y se define como:

$$R_{a,ex} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |E_i - \langle E \rangle|, \quad (5.1)$$

donde N es el número de valores de espesor medidos, E_i el valor experimental de espesor [μm] y $\langle E \rangle$ su valor esperado [μm], calculado de acuerdo con la relación:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i. \quad (5.2)$$

Para la determinación de la rugosidad se midieron los espesores a una distancia de separación que garantizara que no existiera correlación espacial entre los valores medidos, de tal forma que éstos pudieran considerarse independientes. Esta distancia, denominada **distancia de autocorrelación** d_o [μm], se determinó experimentalmente para cada tipo de biopelícula. Adicionalmente fueron fotografiadas las partículas que se desprendieron debido a la erosión provocada por el esfuerzo de corte del fluido, observándose que para la biopelícula formada por *P. aeruginosa* éstas están formadas por pequeños grupos de microorganismos, mientras que para las demás biopelículas están constituidas por grandes conglomerados de éstos [78].

Desafortunadamente no fueron presentados datos relacionados con la evolución temporal del valor esperado del espesor, por lo que en este sentido no fue posible realizar la comparación con respecto a las predicciones de los modelos propuestos. Tampoco se reportaron las condiciones a las que tiene lugar el desarrollo de las biopelículas, ni parámetros cinéticos relacionados con los procesos de reproducción y desprendimiento de la biomasa, por lo que no se pudieron comparar los valores esperados de espesor de estado estacionario teóricos y experimentales.

5.2.2. Modelos empleados

A partir de los resultados reportados y el método experimental utilizado es necesario establecer los modelos específicos que deben ser empleados para realizar adecuadamente la comparación entre los resultados teóricos y los observados. Debido a que se reporta que durante el desarrollo de las biopelículas tuvo lugar el desprendimiento de biomasa provocado por el esfuerzo de corte del fluido, se seleccionaron los modelos propuestos para *biopelícula uniespecie y multiespecie con erosión*. En este último caso se tomó en cuenta que *no se observaron interacciones* entre las especies.

Considerando que usualmente la tasa de reproducción de los microorganismos es mucho mayor que la tasa de muerte, se supuso que en todos los casos la biopelícula está compuesta totalmente por microorganismos vivos. Esto hizo posible que las ecuaciones (4.60) y (4.115) relacionadas con la varianza del espesor total para biopelícula uniespecie y multiespecie con erosión, pudieran escribirse

en función del valor esperado de espesor total. Recordando que la rugosidad se identifica con la raíz cuadrada de la varianza, fueron obtenidas las relaciones que permiten calcular teóricamente su valor. En este caso, para las biopelículas uniespecie formadas por *Pseudomonas aeruginosa* y *Klebsiella pneumoniae* se obtuvo:

$$R_{a,cal} = \sqrt{\frac{1.5v_m}{A_b(1-\epsilon_b)} \langle E \rangle}, \quad (5.3)$$

y para la biopelícula multiespecie formada por las dos especies de microorganismos:

$$R_{a,cal} = \sqrt{\frac{1.5v_m}{A_b(1-\epsilon_b)} \langle E \rangle \left(1 - \frac{2\mu_{1,máx}\mu_{2,máx}}{(\mu_{1,máx} + \mu_{2,máx})^2} \right)}. \quad (5.4)$$

Conociendo que la longitud ℓ entre los valores de espesor tomados para determinar el perfil de la biopelícula fue de $2 \mu m$ y que el ancho de la muestra ω fue de $5 \mu m$, el área de observación para la medición de espesor se calculó como:

$$A_b = \ell\omega = 10. \quad (5.5)$$

Para obtener la ecuación (5.4) se supuso que la concentración de sustrato es mucho mayor que la constante de saturación de Monod para las dos especies de microorganismos, de tal manera que se puede considerar que la tasa de reproducción toma su valor máximo para ambas especies. Por otra parte, se consideró despreciable el volumen ocupado por los productos metabólicos en comparación con el volumen de los microorganismos.

5.2.3. Resultados de la comparación

En las figuras 5.1, 5.2 y 5.3 se muestran los valores predichos de acuerdo a las ecuaciones (5.3) y (5.4) y los resultados experimentales observados. En la figura 5.1 se aprecia que los resultados teóricos no presentan una marcada diferencia con respecto a los observados para el caso de la biopelícula formada por *P. aeruginosa*, mientras que en las figuras 5.2 y 5.3 se observa una diferencia notable entre éstos para el caso de la biopelícula uniespecie formada por *K. pneumoniae* y para la biopelícula binaria.

La comparación cuantitativa entre los resultados teóricos y experimentales se realizó en base al porcentaje de error, definido como:

$$\%Error = \frac{|R_{a,ex} - R_{a,cal}|}{R_{a,ex}} 100\%, \quad (5.6)$$

donde los resultados de esta comparación se muestran en la tabla 5.2.

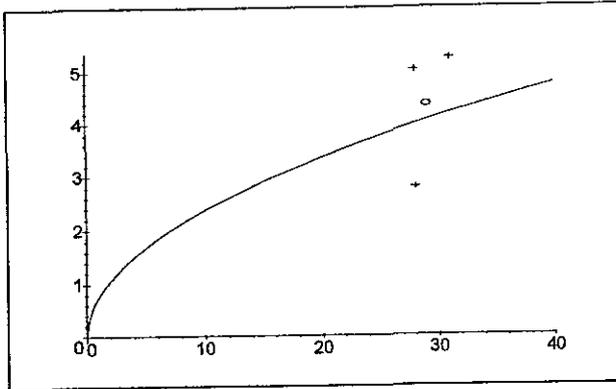


Figura 5.1. R_a [μm] vs $\langle E \rangle$ [μm], para la biopelícula de *P. aeruginosa*. Resultados teóricos (—), experimentales (+) y promedio sobre todos los experimentos (o).

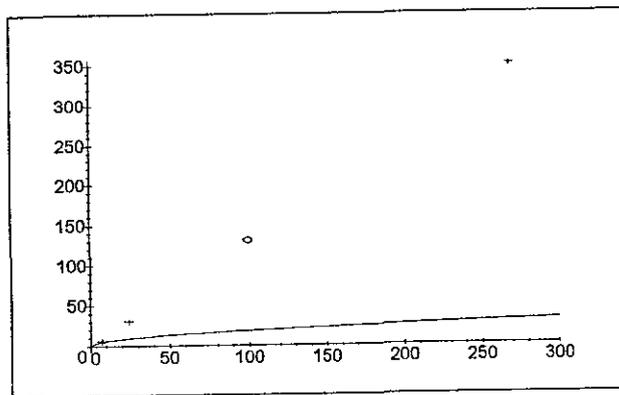


Figura 5.2. R_a [μm] vs $\langle E \rangle_s$ [μm] para la biopelícula de *K. pneumoniae*. Resultados teóricos (—), experimentales (+) y promedio sobre todos los experimentos (o).

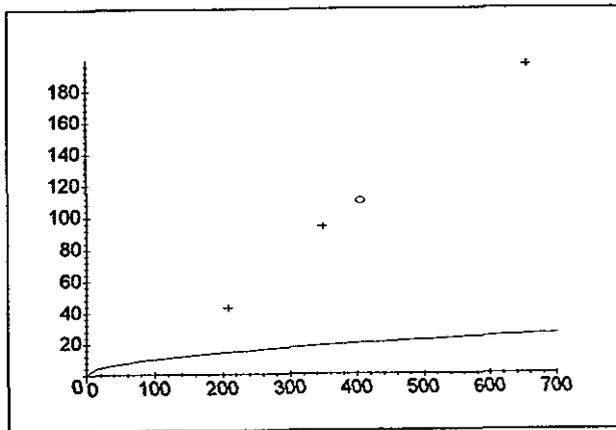


Figura 5.3. $R_a [\mu m]$ vs $\langle E \rangle_s [\mu m]$ para la biopel-
cula binaria. Resultados teóricos (—), experimentales (+)
y promedio sobre todos los experimentos (o)

Al observar los resultados presentados en esta tabla se aprecia que los errores se encontraron entre un 8% y un 41.07% para la biopelícula uniespecie de *P. aeruginosa*, mientras que en los otros casos estos errores son muy significativos, ya que fueron mayores a un 50%. Evidentemente los modelos obtenidos describen adecuadamente el comportamiento experimental para algunas situaciones, mientras que en otras las predicciones son inadecuadas.

Tabla 5.2. Comparación cuantitativa entre los resultados teóricos y los observados experimentalmente por Murga y colaboradores

| Especie | $\langle E \rangle_{ex}$ [μm] | $R_{a,ex}$ [μm] | d_o [μm] | $R_{a,cal}$ [μm] | %Error |
|---------------------|--------------------------------------|------------------------|-------------------|-------------------------|--------|
| <i>P.aeruginosa</i> | | | | | |
| muestra 1 | 31 | 5.27 | 400 | 4.16 | 21.09 |
| muestra 2 | 28 | 2.80 | 100 | 3.95 | 41.07 |
| muestra 3 | 28 | 5.04 | 100 | 3.95 | 21.62 |
| promedio | 29 | 4.37 | 200 | 4.02 | 8.00 |
| <i>K.neumoniae</i> | | | | | |
| muestra 1 | 269 | 357.77 | 4500 | 29.03 | 91.88 |
| muestra 2 | 24 | 30.24 | 2600 | 8.67 | 71.32 |
| muestra 3 | 7 | 5.81 | 500 | 4.68 | 19.44 |
| promedio | 100 | 131.27 | 2500 | 42.38 | 67.71 |
| binaria | | | | | |
| muestra 1 | 208 | 43.68 | 800 | 14.05 | 67.83 |
| muestra 2 | 348 | 93.96 | 800 | 18.18 | 80.65 |
| muestra 3 | 654 | 196.20 | 4800 | 24.92 | 87.29 |
| promedio | 404 | 110.28 | 2100 | 19.05 | 82.72 |

Al observar los resultados presentados en la tabla 5.2 se aprecia que los errores se encontraron entre un 8% y un 41.07% para la biopelícula uniespecie de *P. aeruginosa*, mientras que en los otros casos estos errores son muy significativos, ya que fueron mayores a un 50%. Evidentemente los modelos obtenidos describen adecuadamente el comportamiento experimental para algunas situaciones, mientras que en otras las predicciones son inadecuadas.

5.3. Teoría vs. los datos obtenidos por Peyton

5.3.1. Procedimiento experimental

En 1996 Peyton realizó mediciones de espesor, densidad y rugosidad en una biopelícula uniespecie de *P.aeruginosa* desarrollada en un reactor anular bajo diferentes cargas de sustrato [80]. Las condiciones específicas bajo las que se llevaron a cabo los experimentos son presentadas en la tabla 5.3.

Tabla 5.3. Condiciones experimentales

| Experimento | Concentración de sustrato (gG/m^3) |
|-------------|--|
| 1 | 6.20 |
| 2 | 17.61 |
| 3 | 31.85 |

Uno de los objetivos de su trabajo consistió en determinar la influencia de la concentración de sustrato en el espesor y la rugosidad de la biopelícula. Para ello los valores de espesor fueron medidos por el método óptico de Bakke y Olson (1986) [52], el método de desplazamiento volumétrico de Picologlou (1980) y el método de conductividad eléctrica de Norrman (1977) [51]. En este caso la rugosidad se identificó con la desviación típica de los valores de espesor *puntual* medidos por el método óptico.

Mediante tratamiento estadístico de los resultados experimentales, Peyton ajustó la siguiente relación entre el valor esperado de espesor de estado estacionario y la rugosidad:

$$R_{a,ex}^s = 0.20 \langle E \rangle_s + 1.91, \quad (5.7)$$

donde $R_{a,ex}^s$ y $\langle E \rangle_s$ se determinaron a partir de las siguientes relaciones:

$$\langle E \rangle_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E_i^s, \quad (5.8)$$

$$R_{a,ex}^s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |E_i^s - \langle E \rangle_s|. \quad (5.9)$$

5.3.2. Modelos empleados

Para comparar los resultados teóricos con los experimentales se seleccionó el modelo propuesto para el caso de una *biopelícula uniespecie con erosión*. Tomando en cuenta las condiciones experimentales en que se desarrolló la biopelícula, presentadas en la tabla 5.3, se puede suponer que la tasa de reproducción es mucho mayor que la tasa de muerte, de tal forma que toda la biomasa se consideró compuesta prácticamente por microorganismos vivos.

Estas consideraciones hicieron posible escribir la ecuación (4.74) en función del valor esperado de espesor, obteniéndose la siguiente ecuación para la rugosidad:

$$R_{a,cal} = \sqrt{\frac{1.5}{\Omega} \langle E \rangle}, \quad (5.10)$$

recordándose que por definición:

$$\Omega \equiv \frac{A_b(1 - \epsilon_b)}{v_m} \quad (5.11)$$

Tomando en cuenta que Peyton realizó mediciones *puntuales* de espesor, se estableció una similitud entre $A_b(1 - \epsilon_b)$ y el área ocupada por un microorganismo individual, de tal manera que Ω fue identificado con el inverso de una longitud l que caracteriza el tamaño de los microorganismos. Esta hipótesis se basó en los siguientes hechos. Desde el punto de vista matemático, la medición *puntual* de espesor implica considerar un área de observación que tiende a cero, lo que significa físicamente que el área de observación es infinitamente pequeña en comparación con el área total donde crece la biopelícula. Recordando que la biomasa está constituida por microorganismos, se consideró que el área más pequeña que puede observarse al medir su espesor es la ocupada por un microorganismo individual. De esta manera se supuso la siguiente relación para Ω :

$$\Omega \equiv \frac{1}{l} \quad (5.12)$$

Sustituyendo la ecuación (5.12) en (5.10) se obtuvo la siguiente ecuación para determinar la rugosidad:

$$R_{a,cal}^s = \sqrt{1.5l \langle E \rangle_s} \quad (5.13)$$

donde tomando en cuenta las dimensiones típicas de la *P. aeruginosa* y considerando despreciable el volumen ocupado por los productos metabólicos se supuso:

$$l = 1.7 \mu m.$$

5.3.3. Resultados de la comparación

La comparación cualitativa entre el comportamiento teórico de la rugosidad vs. valor esperado de espesor y el comportamiento obtenido por Peyton, mediante ajuste estadístico de los datos experimentales se muestra en la figura 5.4. En esta figura se aprecia que, aunque existen diferencias cualitativas entre ambos comportamientos, no existe un alejamiento altamente significativo entre éstos. Al respecto, conviene señalar que hubiese sido conveniente realizar una comparación más precisa entre los datos experimentales y los teóricos empleando las técnicas estadísticas habituales, independientemente del comportamiento ajustado por Peyton. Sin embargo, esto no fue posible debido a que en la bibliografía consultada los datos aparecen reportados gráficamente, por lo que sus valores sólo pueden ser obtenidos por apreciación visual.

La comparación cuantitativa entre los resultados experimentales y los teóricos se muestra en la tabla 5.4.

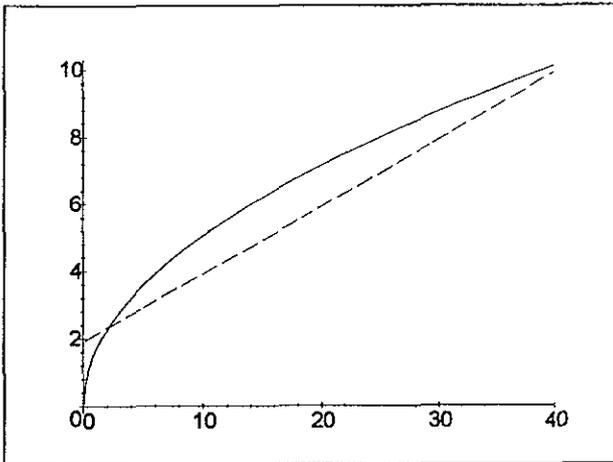


Figura 5.4. R_a^s [μm] vs $\langle E \rangle_s$ [μm]

(—): resultado predicho,

(- - -) resultado experimental

Tabla 5.4. Comparación cuantitativa entre los resultados teóricos y los resultados experimentales obtenidos por Peyton

| $\langle E \rangle_{s,ex} [\mu m]$ | $R_{a,ex}^s [\mu m]$ | $R_{a,cat}^s [\mu m]$ | %Error |
|------------------------------------|----------------------|-----------------------|--------|
| 6.20 | 3.15 | 3.97 | 26.03 |
| 17.61 | 5.43 | 6.70 | 23.38 |
| 31.85 | 8.28 | 9.01 | 8.81 |

Al observar la tabla 5.4 se puede apreciar que los errores fueron menores de 25% para las tres situaciones analizadas. En la fila tres de esta tabla se aprecia que el error fue menor de un 10%, lo que indica una buena predicción del modelo propuesto para esta situación específica.

5.4. Estocástico vs. determinista

En la figura 5.5 se compara el comportamiento del valor esperado de espesor de estado estacionario con respecto a la concentración de sustrato predicho por los modelos estocásticos propuestos, el modelo determinista de Rittmann [19] y los resultados experimentales observados [30]. En este caso se puede apreciar que no existen grandes diferencias entre éstos para valores pequeños de espesor, pero a medida que la concentración de sustrato aumenta se observa una desviación apreciable. Esto se debe a que en los modelos propuestos no se tomó en cuenta la influencia de la difusión, que juega un papel importante a medida que el espesor de biopelícula aumenta. Desde este punto de vista, los modelos deterministas que sí consideran este fenómeno son más adecuados para describir el comportamiento del valor esperado de espesor que los modelos propuestos, pero presentan la desventaja de que son incapaces de predecir las fluctuaciones del espesor y la rugosidad de la biopelícula.

5.5. Alcance y limitaciones de los modelos

Los resultados de la comparación entre los resultados teóricos y los observados experimentalmente permiten analizar las limitaciones y el alcance de los modelos propuestos. Recordando que sólo en pocos casos los errores observados fueron menores a un 10%, se aprecia que estos modelos sólo describen aproximadamente el comportamiento de las biopelículas. Esto se debe, fundamentalmente, a las consideraciones establecidas que fueron presentadas en el capítulo 4 y sobre las que a continuación se elabora.

En primer lugar, debe recordarse que es bien conocido que en el interior de la biopelícula se presenta un determinado perfil de concentración de oxígeno y

sustrato con respecto al espesor, tal y como se presenta en la figura 5.2. Recordando que la tasa de reproducción de los microorganismos es una función de estas variables [20], ésta también depende del espesor. Sin embargo, para obtener los modelos propuestos se supuso que todos los microorganismos vivos de una misma especie tienen igual tasa de reproducción. Por lo tanto, no se toma en cuenta la influencia de la difusión, la que juega un papel fundamental a partir del momento en que la biopelícula alcanza un determinado espesor [22, 25, 26]. En segundo lugar, al considerarse que las tasas de reproducción y muerte de los microorganismos y la constante específica de velocidad de desprendimiento son variables deterministas no se toman en cuenta las fluctuaciones externas que se producen en el espesor de la biopelícula como resultado de la variabilidad intrínseca del ambiente.

En tercer lugar se supuso que todos los microorganismos, independientemente de si estén vivos o muertos, o de la especie a la que pertenecen, presentan la misma constante de velocidad de desprendimiento. En principio, este parámetro está relacionado con el esfuerzo de corte del fluido, pero no se conoce con exactitud qué otros factores engloba ni su dependencia con respecto al espesor y las propiedades de las biopelículas [32, 33].

En cuarto lugar, no se consideró la deposición y el atrapamiento de los microorganismos, que juega un papel fundamental en las primeras etapas de formación de las biopelículas, ni el efecto de la edad de la biomasa. Tampoco se tomó en cuenta la lisis celular que ocurre posterior al cese de la actividad metabólica, la generación de los productos metabólicos, la estructura interna espacialmente heterogénea de la biopelícula y la formación de los conglomerados de microorganismos que la caracteriza.

La incapacidad de los modelos para predecir el comportamiento de la biopelícula uniespecie formada por *K. pneumoniae* y de la biopelícula binaria se atribuye, además de a los aspectos planteados anteriormente, a que en estas biopelículas se observó que las partículas desprendidas están formadas por grandes conglomerados de microorganismos, lo que tal vez sea un resultado de posibles procesos de agregación y floculación que tienen lugar en el interior de la biomasa que no fueron tomados en cuenta. En realidad esto es solo una hipótesis, ya que no se conoce exactamente el mecanismo que gobierna el desprendimiento en sí. Para tomar en cuenta este aspecto deben incluirse en la formulación de la EM los procesos de agregación que pueden ocurrir.

Sin embargo, es posible extender en trabajos futuros el alcance de los modelos propuestos, superándose algunas de las limitaciones más importantes. Por una parte, para describir la influencia de la difusión se precisa modelar las fluctuaciones internas espaciales. Esto implica expresar la distribución de probabilidad asociada a la evolución temporal de la biopelícula como función de una variable continua que represente la posición espacial y, por lo tanto, en función de un número infinito de variables. Esto involucra una complejidad matemática mucho mayor y, de hecho, es un aspecto aún no resuelto totalmente en la teoría de procesos estocásticos,

aunque pudiera aplicarse el método de los momentos compuestos propuesto por van Kampen para los procesos de reacción-difusión [102].

Por otra parte, la consideración de las fluctuaciones externas requiere da tomar en cuenta que los parámetros externos al sistema -en este caso temperatura, composición, concentración y flujo de agua residual- y de los que dependen las tasas de reproducción y muerte de los microorganismos y la constante específica de velocidad de desprendimiento, son variables aleatorias en vez de deterministas y emplear el mismo enfoque estocástico utilizado en este trabajo [101].

Obsérvese que, a pesar de su carácter aproximado, **los modelos estocásticos propuestos presentan la ventaja de que permiten predecir el comportamiento dinámico de las fluctuaciones internas temporales que se presentan en el espesor de la biomasa y que se manifiestan a través de la rugosidad. Por tanto, permiten analizar las situaciones en que estas fluctuaciones deben ser consideradas desde el punto de vista ingenieril ya que afectan la operación de los procesos relacionados con biopelículas. De esta forma, superan una de las limitaciones más señaladas de los modelos deterministas actuales que describen estos sistemas.**

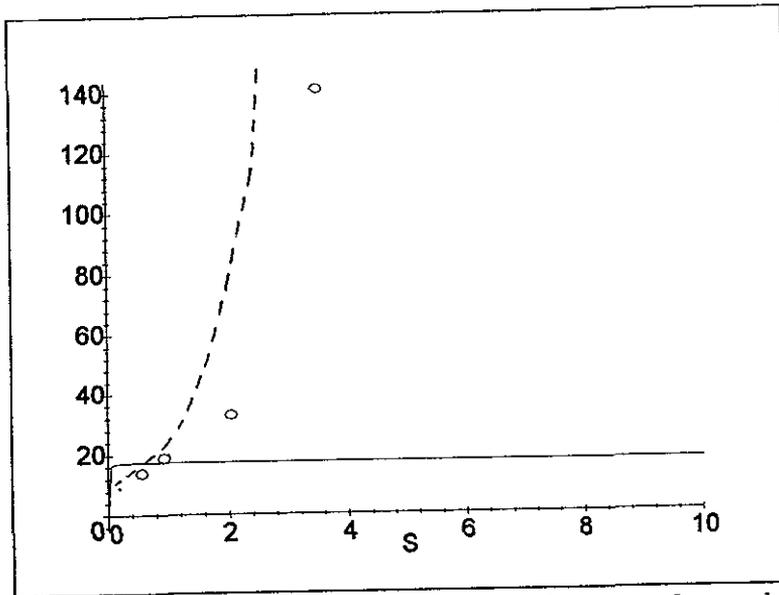


Figura 5.5. $\langle E \rangle$ vs. S : Resultados predichos por los modelos propuestos, resultados predichos por los modelos deterministas (línea de trazos) y resultados medidos experimentalmente (puntos)

6. Influencia de las fluctuaciones internas temporales de la biopelícula en la operación de los filtros percoladores

En el capítulo 4 se proponen un conjunto de modelos que permiten describir aproximadamente el comportamiento de las fluctuaciones internas temporales que se producen en el espesor de biopelícula. El objetivo de este capítulo consiste en emplear los modelos propuestos para predecir la influencia de estas fluctuaciones en el comportamiento de los filtros percoladores. Al respecto se analizaron dos situaciones generales: operación en estado estacionario y operación en estado no estacionario.

En el caso de la operación en estado estacionario, la estrategia aplicada consistió en obtener un modelo determinista del comportamiento de los filtros percoladores que tomara en cuenta explícitamente el espesor de biopelícula. Posteriormente, esta variable se identificó con una variable estocástica cuya evolución se describe por los modelos propuestos, a partir de lo cual se analizó cuantitativamente el comportamiento estocástico de la concentración de sustrato de salida. En el caso de la operación en estado no estacionario, se analizó cualitativamente el efecto de estas fluctuaciones en el comportamiento de estos sistemas.

6.1. Operación de estado estacionario

6.1.1. Consideraciones

Para obtener el modelo determinista de filtro percolador fue necesario establecer un conjunto de consideraciones consecuentes con las establecidas en los modelos estocásticos propuestos que se presentan en el capítulo 4. De acuerdo con éstas, se supusieron los siguientes aspectos:

- i) el filtro se encuentra operando en *estado estacionario*,
- ii) *no existen fluctuaciones* en la temperatura, flujo, composición y concentración del influente,
- iii) la biopelícula se encuentra en la *fase de estado estacionario*,
- iv) el agua residual se distribuye de forma *completamente uniforme* sobre la

superficie del empaque,

- v) todos los microorganismos están vivos,
- vi) el efecto de la difusión del sustrato limitante en el interior de la biopelícula y en el fluido es despreciable, de tal manera que la concentración de sustrato es constante con respecto al espesor e igual a la del seno del fluido,
- vii) la biopelícula está formada por una sola especie de microorganismos, debido a que es muy difícil establecer con certeza el número de especies y las interacciones entre éstas, además de que la consideración del caso de una biopelícula multiespecie complica enormemente la solución de los modelos que se obtengan,
- viii) la cinética de reproducción de los microorganismos responde a la ecuación de Monod expresada en función de la concentración de sustrato limitante y, al respecto, se considera que ésta es mucho mayor que la constante de saturación que aparece en esta ecuación,
- ix) no se toma en cuenta la generación de los productos del metabolismo, los cambios fisiológicos y genéticos, ni la edad de la biopelícula y
- xi) el mecanismo que gobierna la acumulación de biomasa es el desprendimiento de biopelícula por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido.

6.1.2. Modelo determinista de biopelícula

Desde el punto de vista **determinista**, para un diferencial de biomasa $d\varepsilon$, estado estacionario, se cumple la siguiente relación [19]:

$$\frac{\mu_{m\acute{a}x}\rho_f S_f}{(K_s + S_f)} A_b d\varepsilon - b A_b \rho_f d\varepsilon - K_d^* \varepsilon A_b \rho_f d\varepsilon = 0, \quad (6.1)$$

donde ε es el espesor de la biopelícula [L], $\mu_{m\acute{a}x}$ es la tasa máxima de reproducción de los microorganismos, ρ_f es la densidad de la biomasa en base húmeda [$M_b L^{-3}$], K_s es la constante de saturación de Monod [$M_s L^{-3}$], S_f es la concentración de sustrato en el interior de la biopelícula [$M_s L^{-3}$], A_b es el área superficial del sólido donde crece la biopelícula y K_d^* es una constante relacionada con la velocidad de desprendimiento [$t^{-1} L^{-1}$].

Tomando en cuenta las consideraciones establecidas e integrando con respecto al espesor de biomasa se obtiene:

$$\int_0^E \mu_{m\acute{a}x} \rho_f A_b d\varepsilon - \int_0^E K_d^* \varepsilon A_b \rho_f d\varepsilon = 0. \quad (6.2)$$

Resolviendo la integral (6.2) y despejando adecuadamente se obtiene la siguiente expresión para el espesor de biopelícula en estado estacionario:

$$E = \frac{\mu_{m\acute{a}x}}{2K_d^*}, \quad (6.3)$$

donde por conveniencia se estableció:

$$K_d \equiv \frac{K_d^*}{4}. \quad (6.4)$$

6.1.3. Modelo determinista para la remoción de sustrato en la biopelícula

De acuerdo a la **teoría de la biopelícula** y recordando que el transporte del sustrato limitante se produce preferentemente en la dirección perpendicular a la superficie de la biopelícula, se obtiene que la concentración de sustrato en el interior de la biopelícula S_f responde a la siguiente ecuación diferencial parcial [19, 20]:

$$\frac{\partial S_f}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 S_f}{\partial \varepsilon^2} - \frac{\mu_{\max} \rho_f S_f}{Y (K_s + S_f)}, \quad (6.5)$$

sujeta a las condiciones límites:

$$S_f = S \text{ para } \varepsilon = E, \quad (6.6)$$

$$\frac{\partial S_f}{\partial \varepsilon} = 0 \text{ para } \varepsilon = 0, \quad (6.7)$$

$$S_f = S_0 \text{ para } t = 0, \quad (6.8)$$

donde t representa el tiempo [t], D_f es la difusividad del sustrato en el interior de la biopelícula [$L^2 t^{-1}$], Y es el coeficiente de rendimiento definido como masa de microorganismos producida por masa de sustrato consumido [$M_m M_s^{-1}$], y S es la concentración de sustrato en el seno del fluido.

La cantidad de sustrato removido J por unidad de área superficial del empaque, conocido como **flux de sustrato removido** [$M_s L^{-2} t^{-1}$], se determina a partir de la siguiente relación:

$$J = D_f \left(\frac{\partial S_f}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=E}, \quad (6.9)$$

donde E representa el espesor total de la biopelícula [L].

De acuerdo a todas las consideraciones establecidas, a partir de las ecuaciones anteriores se obtiene la siguiente ecuación particular para calcular J :

$$J = \frac{\mu_{\max} \rho_f}{Y} E. \quad (6.10)$$

6.1.4. Modelación determinista del filtro percolador

Tomando en cuenta que las consideraciones establecidas y recordando que el agua residual percola en la dirección paralela a la profundidad del filtro, el comportamiento de la concentración de sustrato en el agua residual con respecto a la profundidad responde a la siguiente ecuación diferencial [19]:

$$v \frac{dS}{dz} = -A_{esp} J, \quad (6.11)$$

sujeta a la condición:

$$S = S_i \text{ para } z = 0, \quad (6.12)$$

donde v es el flujo de agua residual aplicado por unidad de área de sección transversal del empaque [Lt^{-1}], A_{esp} es el área específica del empaque [L^{-1}], z es la profundidad del filtro [L] y S_i es la concentración de sustrato en el influente [$M_s L^{-3}$].

Sustituyendo la ecuación (6.10) en la ecuación (6.11), separando variables en la ecuación diferencial resultante e integrando:

$$\int_{S_i}^{S_e} dS = - \int_0^z A_{esp} \frac{\mu_{máx} \rho_f}{Yv} E dz. \quad (6.13)$$

En la ecuación (6.3) se observa que E es independiente de la concentración de sustrato y por tanto de la profundidad del filtro, por lo que esta integral puede resolverse muy fácilmente, obteniéndose la siguiente expresión para calcular la concentración de sustrato en el agua tratada:

$$S_e = S_i - \frac{A_b \mu_{máx} \rho_f}{YQ} E, \quad (6.14)$$

donde S_e es la concentración de sustrato del efluente y Q es el flujo de agua residual aplicado [$L^3 t^{-1}$].

6.1.5. Modelo estocástico del filtro percolador

Si en la ecuación (6.14) se supone que la variable E puede ser sustituida por una **variable estocástica** E^* , cuyo comportamiento se describe por los modelos propuestos en el capítulo 4, la concentración de sustrato S_e se identifica con la variable estocástica S_e^* , obteniéndose:

$$S_e^* = S_i - \frac{A_{emp} \mu_{máx} \rho_f}{YQ} E^*. \quad (6.15)$$

Considerando como sistema al filtro percolador, cuyo comportamiento se describe a través de la concentración de sustrato del efluente, entonces la ecuación (6.15) representa un modelo estocástico de éste que permite tomar en cuenta las fluctuaciones internas temporales que tienen lugar en el espesor de la biopelícula

y, por tanto, analizar la influencia de estas fluctuaciones en la concentración de contaminantes a la salida.

Por otra parte, al establecer que el filtro opera en estado estacionario, entonces la función de distribución de probabilidad asociada a S_e^* es **normal o gaussiana**, por lo que sólo basta el conocimiento de sus dos primeros momentos para describir completamente al sistema desde el punto de vista estocástico. En este caso se establece para el valor esperado de S_e^* :

$$\begin{aligned}\langle S_e^* \rangle &= \int \left(S_i - \frac{A_b \mu_{\text{máx}} \rho_f}{YQ} E^* \right) P_{E^*,s} dE^* \\ &= S_i - \frac{A_b \mu_{\text{máx}} \rho_f}{YQ} \langle E \rangle_s,\end{aligned}\quad (6.16)$$

y para la varianza de S_e^* :

$$\begin{aligned}\sigma_{S_e^*}^2 &= \int \left(S_i - \frac{A_b \mu_{\text{máx}} \rho_f}{YQ} E^* \right)^2 P_{E^*,s} dE^* - \langle S_e^* \rangle_s^2 \\ &= \left(\frac{A_b \mu_{\text{máx}} \rho_f}{YQ} \right)^2 \sigma_{E^*,s}^2.\end{aligned}\quad (6.17)$$

De acuerdo con el modelo propuesto en el capítulo 4 para el caso de una *biopelícula uniespecie con erosión en la fase de estado estacionario*, la variable estocástica E^* se describe por una función de distribución de probabilidad normal o gaussiana donde su valor esperado y varianza responden a las siguientes ecuaciones:

$$\langle E^* \rangle_s = \frac{\mu_{\text{máx}}}{2K_d}, \quad (6.18)$$

$$\sigma_{E^*,s}^2 = \frac{3\mu_{\text{máx}} v_m}{4K_d A_b (1 - \epsilon_b)}. \quad (6.19)$$

Sustituyendo (6.18) en (6.16) y (6.19) en (6.17) se obtiene para el valor esperado de la concentración de sustrato del efluente:

$$\langle S_e^* \rangle_s = S_i - \frac{A_b \mu_{\text{máx}}^2 \rho_f}{2K_d YQ}, \quad (6.20)$$

y para la varianza:

$$\sigma_{S_e^*,s}^2 = \frac{3\mu_{\text{máx}}^3 \rho_f^2 A_b v_m}{4K_d (1 - \epsilon_b) (YQ)^2}, \quad (6.21)$$

donde la ecuación (6.21) se puede escribir en función del valor esperado de la concentración de sustrato del efluente:

$$\sigma_{S_{e,s}}^2 = \frac{3\mu_{m\acute{a}x}\rho_f v_m}{2(1-\epsilon_b)YQ} (S_i - \langle S_e^* \rangle). \quad (6.22)$$

6.1.6. Análisis cuantitativo de la influencia de las fluctuaciones

Para analizar cuantitativamente la influencia de las fluctuaciones internas del espesor de biopelícula en la variabilidad de la concentración de sustrato del effluente de los filtros percoladores se consideraron los parámetros típicos que se muestran en la tabla 6.1, tomados de la bibliografía consultada [20].

Tabla 6.1. Parámetros cinéticos y propiedades de las biopelículas

| Parámetro | valor |
|---------------------|-------------------------|
| $\mu_{m\acute{a}x}$ | $4 d^{-1}$ |
| Y | $0.5 \frac{mg_b}{mg_s}$ |
| ϵ_b | 0.9 |
| K_d | $100 cm^{-1}d^{-1}$ |
| ρ_f | $40 \frac{mg}{cm^3}$ |
| v_m | $10^{-12} cm^3$ |

Sustituyendo estos valores en (6.22) se obtiene la siguiente ecuación para la determinación de la varianza en función de las variables de entrada y de diseño:

$$\begin{aligned} \sigma_{S_{e,s}}^2 &= 3 \left(\frac{A_b}{Q^2} \right) 10^{-8} \\ &= 3 \left(\frac{1}{\nu Q} \right) 10^{-8} \\ &= \frac{4 \left(1 - \frac{\langle S_e^* \rangle}{S_i} \right) 10^{-9}}{S_i Q}, \end{aligned} \quad (6.23)$$

donde ν representa el flujo de agua residual por unidad de área superficial del empaque.

Resulta interesante analizar bajo qué condiciones las fluctuaciones internas temporales que se presentan en el espesor de la biopelícula juegan un papel importante en el comportamiento operativo de los filtros percoladores. De acuerdo con la ecuación (6.23), considerando un filtro percolador arbitrario, cuyos parámetros cinéticos y propiedades de las biopelícula se muestra en la tabla 6.1, el modelo predice el comportamiento que se muestra en la figura 6.1.

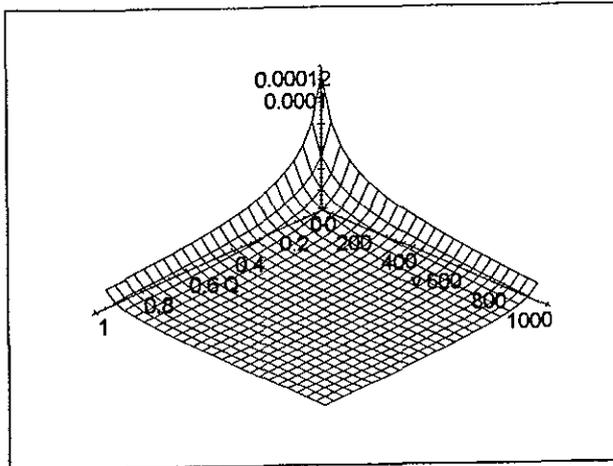


Figura 6.1. Influencia de las fluctuaciones internas temporales en el espesor de biopelícula para un filtro percolador arbitrario. El eje vertical representa la desviación típica de la concentración de sustrato de salida $\left[\frac{mg}{cm^3}\right]$, v es el flujo aplicado por unidad de área superficial del empaque $\left[\frac{cm^3}{cm^2d}\right]$ y Q el flujo neto $\left[\frac{cm^3}{d}\right]$

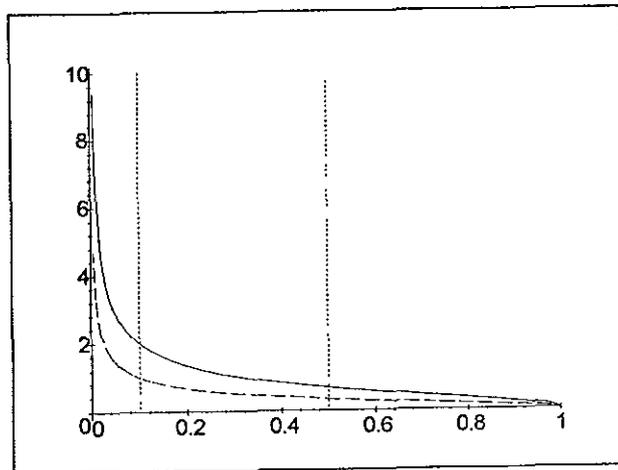


Figura 6.2. $\frac{\sigma_{S_i^*}}{S_i^*} 10^6$ vs. $\frac{S_i^*}{S_i}$ donde:
 (—): desviación con respecto al valor esperado de DBO en el efluente, (---): desviación con respecto al valor esperado de DQO en el efluente, (- -): valores de $\frac{S_i^*}{S_i}$ establecidos por diseño

De acuerdo con esta figura y tomando en cuenta que la concentración de sustrato con base en la DBO_5 en el efluente se encuentra entre 0.025 y 0.1 mg/cm^3 **las fluctuaciones internas del espesor de biopelícula afectan significativamente el comportamiento operativo de los filtros percoladores cuando el flujo de agua residual por unidad de área superficial del empaque y el flujo neto aplicado son muy pequeños.**

Para comparar los resultados predichos por el modelo con los determinados experimentalmente a partir de los datos de operación del filtro percolador de la Planta de Tratamiento de Residuales de la Ciudad Universitaria de la UNAM, México D.F., que se presentan en el **Anexo A**, resulta conveniente deducir a partir de la ecuación (6.23) una expresión que permita cuantificar la magnitud de las fluctuaciones en la concentración de sustrato del efluente en relación con su valor esperado. En este caso se obtuvo:

$$\frac{\sigma_{S_{e,s}^*}}{\langle S_e^* \rangle} = \frac{2}{S_i \sqrt{Q}} 10^{-3} \sqrt{\frac{1 - \frac{\langle S_e^* \rangle_e}{S_i}}{\frac{\langle S_e^* \rangle_e}{S_i}}}, \quad (6.24)$$

donde $\sigma_{S_{e,s}^*}$ representa la magnitud absoluta de las fluctuaciones y se identifica con la raíz cuadrada de la varianza. En las ecuaciones (6.23) y (6.24) S_i se expresa en $\left[\frac{mg}{cm^3}\right]$ y Q en $\left[\frac{cm^3}{d}\right]$.

Tomando en cuenta los valores de concentración de sustrato en el influente y flujo de agua residual establecidos por diseño para este sistema y que se presentan en el **Anexo A**, se obtiene el comportamiento que se muestra en la figura 6.2. En esta figura se observa que el modelo estocástico propuesto para el filtro percolador predice que la magnitud relativa de las fluctuaciones que se producen en la concentración de sustrato del efluente son del orden de 10^{-6} . *De acuerdo con este orden, estas fluctuaciones ni siquiera pueden ser detectadas con los métodos de medición de concentración de sustrato que se emplean comúnmente.* Sin embargo, las fluctuaciones observadas en este filtro no sólo pueden ser medidas, sino que son de una magnitud comparable al valor esperado de concentración de sustrato de salida, y afectan significativamente la confiabilidad de operación.

Para explicar esta diferencia entre los resultados predichos y los observados es necesario tomar en cuenta todas las consideraciones que se establecieron al obtener los modelos estocásticos presentados. No obstante, es preciso señalar que los resultados predichos son lógicos. Al analizar las fluctuaciones en la concentración de sustrato de salida, *sólo fueron tomadas en cuenta las fluctuaciones internas temporales que se producen en el espesor de biopelícula.* Más, por su propia naturaleza, estas fluctuaciones prácticamente se anulan cuando el área donde crece la biopelícula es mucho mayor que el área ocupada por un microorganismo individual, como ocurre en el caso de este filtro percolador.

Evidentemente esto indica que en este filtro percolador *no son las fluctuaciones internas que se presentan en el espesor de la biopelícula las responsables de*

las fluctuaciones de la concentración de sustrato de salida. Las causas de éstas, por tanto, se deben esencialmente a las fluctuaciones externas que se producen como resultado de la naturaleza aleatoria intrínseca de la temperatura, concentración, composición y flujo del agua residual. Estas fluctuaciones tienen valores significativos, como se puede apreciar en el **Anexo A**.

Por otra parte, las fluctuaciones internas temporales que se presentan en el espesor le confieren un determinado carácter rugoso a la superficie de la biopelícula. Aunque esta rugosidad no afecta explícitamente la cantidad de sustrato removido, sí influye en el régimen de flujo [45] y la transferencia de masa y, por tanto, en última instancia, en la eficiencia del sistema. Este efecto puede cuantificarse a través del **número de Reynolds rugoso** definido como [58]:

$$R_e^r = \frac{\rho \langle V \rangle \langle E \rangle}{\varphi} \left(\frac{f}{8} \right)^{0.5}, \quad (6.25)$$

donde ρ es la densidad [ML^{-3}] y φ la viscosidad [$ML^{-1}t^{-1}$] del agua residual, $\langle V \rangle$ es la velocidad promedio del fluido [Lt^{-1}], $\langle E \rangle$ es el valor esperado de espesor de biomasa [L] y f es el factor de fricción.

Si $R_e^r < 70$ la rugosidad no influye en el régimen de flujo y el área de transferencia de masa se hace igual al área superficial del empaque. Si $R_e^r > 70$ la rugosidad afecta la capa límite de concentración de sustrato y el área de transferencia de masa se hace igual al área superficial de la biopelícula, la que, por efecto de la rugosidad, es mayor que el área del empaque [58].

Aunque en principio este efecto puede ser tomado en cuenta en la modelación de filtros percoladores, la limitación fundamental radica en que, al menos en la literatura consultada, no fueron encontradas expresiones para estimar los valores de f en estos sistemas, ni referencias relacionadas con trabajos realizados al respecto.

6.2. Operación de "puesta en marcha"

La etapa de "puesta en marcha" de los filtros percoladores se identifica desde el punto de vista ingenieril con aquella etapa de operación en estado no estacionario en la que se produce la formación y desarrollo de la biomasa sobre la superficie del empaque, y requiere la recirculación continua de un agua residual con alta concentración de sustrato y microorganismos suspendidos.

Desde el punto de vista de la evolución temporal de la biopelícula, es de esperar que en esta etapa, dicha biopelícula se encuentre en las fases de retardo y crecimiento exponencial. Al respecto, conviene señalar que se ha planteado que la fase de crecimiento exponencial puede presentarse en los filtros percoladores aún cuando éstos se encuentren operando en estado estacionario [20].

De acuerdo con los modelos propuestos en este trabajo se predice, recordando los aspectos analizados en el capítulo 4, que las fluctuaciones internas temporales en el espesor de la biopelícula aumentan indefinidamente con el tiempo cuando

se encuentra en la fase de crecimiento exponencial -caso I, biopelícula uniespecie sin desprendimiento-. Esto sugiere que las fluctuaciones temporales del espesor de biopelícula pueden alcanzar valores tales que generen inestabilidades durante la "puesta en marcha" de los filtros percoladores que incrementen la duración de esta etapa y, en el caso más crítico, pueden impedir que el filtro percolador alcance la condición de estado estacionario en un tiempo razonable. Evidentemente esto es muy importante desde el punto de vista ingenieril, económico y de la conservación del medio ambiente, de acuerdo con la función específica que realizan estos sistemas. Obsérvese que precisamente una de las ventajas mayores que presentan los modelos estocásticos propuestos es que, a diferencia de los modelos deterministas actuales, permiten analizar estas situaciones y establecer desde el punto de vista práctico las condiciones de operación adecuadas que permitan minimizar el efecto de estas fluctuaciones.

Recordando los aspectos planteados en el capítulo 2, es necesario señalar que, aunque los modelos propuestos no lo toman en cuenta, en la operación real de estos sistemas se produce el desprendimiento esporádico de porciones de biomasa de tamaño comparable a su espesor en determinados sitios del empaque, los que quedan disponibles para que se produzca el desarrollo de biopelícula joven. Evidentemente, en estos sitios la biopelícula se puede encontrar en la fase de crecimiento exponencial, donde las fluctuaciones internas temporales se incrementan con el tiempo. Esto podría generar fluctuaciones e inestabilidades en la remoción de sustrato en estas zonas y, por tanto, generar inestabilidades en el comportamiento global del filtro que afectarían su eficiencia.

Para analizar cuantitativamente los aspectos anteriores de acuerdo a la estrategia adoptada para el caso estacionario, es preciso obtener los modelos deterministas de la operación en estado no estacionario, lo que implica la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. De hecho, los modelos deterministas de filtro percolador actuales reportados en la literatura consultada no consideran esta situación debido a la complejidad matemática involucrada [19, 36, 37], aún cuando la teoría de la biopelícula sí toma en cuenta el comportamiento no estacionario de la biopelícula bajo determinadas condiciones que permitan la obtención de soluciones analíticas [25]-[27]. Debido a la complejidad de este análisis el mismo no es objetivo de este trabajo, aunque obviamente éste puede ser realizado en trabajos futuros, abriéndose nuevas perspectivas al respecto.

Conclusiones y perspectivas

En este trabajo han sido presentados un conjunto de modelos estocásticos para predecir el comportamiento temporal de las biopelículas y su influencia en la operación de los filtros percoladores considerando tres casos fundamentales: **Caso I:** *biopelícula uniespecie sin desprendimiento de biomasa*, **Caso II:** *biopelícula uniespecie con desprendimiento de biomasa por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido* y **Caso III:** *biopelícula multiespecie con desprendimiento de biomasa por la erosión ejercida por el esfuerzo de corte del fluido*.

En la formulación de estos modelos se supuso el punto de vista mesoscópico para describir el comportamiento temporal de la biopelícula. Como resultado, no solamente se describe la evolución del valor esperado de su espesor, sino también las fluctuaciones temporales que se producen alrededor de este valor, relacionadas con la rugosidad de las biopelículas. Esto permite superar una de las limitaciones más importantes de los modelos deterministas actuales de estos sistemas, incapaces de describir estas fluctuaciones y su influencia en la operación de los filtros percoladores y otros procesos relacionados con biopelículas.

Existen situaciones en que los modelos propuestos para el caso de una biopelícula uniespecie con erosión pueden estimar con un error menor al 10% el comportamiento de la rugosidad de la biopelícula, como se observó cuando se compararon los resultados predichos con los experimentales. Estas situaciones se presentan cuando el espesor de biopelícula es lo suficientemente pequeño como para poder considerar despreciable el efecto de la difusión del sustrato, las condiciones ambientales en que tiene lugar el desarrollo de la biopelícula no presenten una variabilidad temporal apreciable y el mecanismo de relacionado con la erosión sea tal que las partículas desprendidas estén formadas por pequeños conglomerados de microorganismos.

Por otra parte, aunque el modelo obtenido para el caso de la biopelícula uniespecie sin erosión no predice un comportamiento cualitativo del espesor totalmente acorde con el observado experimentalmente, puede utilizarse con éxito para el caso de biopelículas jóvenes en la fase de crecimiento exponencial, aunque en este trabajo no se realizó la correspondiente comparación entre los resultados teóricos y experimentales por no haberse encontrado información al respecto en la literatura consultada.

No obstante, en determinadas ocasiones los errores entre los resultados experimentales y los teóricos superaron el 50%, demostrando una predicción inadecuada.

cuada. Esto se atribuye al establecimiento de un conjunto de consideraciones que le confieren determinadas limitaciones a los modelos propuestos, algunas de las cuales fueron necesarias e inevitables para poder obtener modelos solubles con las herramientas matemáticas disponibles en la actualidad, tales como el no tomar en cuenta la influencia de la edad de la biomasa y el suponer que la evolución temporal de las biopelículas es un proceso ergódico.

Otro de los hechos importantes es la no consideración del efecto de la difusión y transporte del sustrato en el interior de la biomasa, que se ha demostrado juega un papel fundamental en el comportamiento dinámico de las biopelículas cuando éstas alcanzan un determinado espesor. Para tomar en cuenta este efecto es necesario modelar las fluctuaciones internas espaciales y establecer que las tasas de muerte y reproducción de los microorganismos y la constante específica de velocidad de desprendimiento dependen de la posición espacial, por lo que también la distribución de probabilidad asociada al espesor dependerá de ésta.

Debido a que la posición espacial se describe en función de un número infinito de variables, al considerar las fluctuaciones internas espaciales la distribución de probabilidad quedará expresada en función de un número infinito de variables, por lo que la solución de la Ecuación Maestra involucra una complejidad matemática considerable. Aunque la solución de una EM de este tipo es un aspecto que aún no se ha resuelto totalmente por la teoría de los procesos estocásticos, uno de los métodos que podría emplearse en trabajos futuros para superar esta limitación de los modelos propuestos es el método de los momentos compuestos propuesto por van Kampen para los procesos de reacción-difusión. En esencia, este método consiste en considerar la dependencia espacial sólo en el primer y en el segundo momento de la distribución de probabilidad, de ahí su carácter aproximado.

A partir de los modelos obtenidos fue analizada la influencia de las fluctuaciones internas del espesor de biopelícula en el comportamiento operativo estacionario de los filtros percoladores. Este análisis mostró que éstas pueden provocar una variabilidad apreciable en la concentración de sustrato del efluente y, por ende, afectar la confiabilidad de la operación estacionaria, cuando el flujo de agua residual por área superficial del empaque y el flujo neto aplicado son muy pequeños. Sin embargo, los cálculos realizados mostraron que para los valores típicos de estas variables que se establecen a *escala industrial*, la influencia de estas fluctuaciones en la concentración de sustrato de salida y en la confiabilidad de operación es prácticamente despreciable, resultado lógico si se consideran que las fluctuaciones internas temporales del espesor de biopelícula se anulan cuando el área del empaque es mucho mayor que el área de un microorganismo individual.

Sin embargo, en el **Anexo A** se observa que las fluctuaciones que se presentan en la concentración de sustrato de salida no sólo no son despreciables, sino que son de magnitud comparable a su valor esperado e influyen significativamente en la confiabilidad de la operación.

Esta incongruencia se debe a que al considerar que las tasas de reproducción

y muerte de los microorganismos y la velocidad específica de desprendimiento por erosión son variables deterministas, se establece que los parámetros externos al sistema -temperatura, concentración, composición y flujo de residual de los cuales éstas dependen- son también variables deterministas. Por esta razón no se toma en cuenta la variabilidad intrínseca temporal de estos parámetros, típica de todos los procesos de tratamiento biológico de aguas residuales, por lo que los modelos propuestos no pueden describir la influencia de las fluctuaciones externas en la evolución temporal de las biopelículas y, por ende, en el comportamiento operativo de los filtros percoladores.

No obstante, esta limitación de los modelos estocásticos propuestos puede ser superada en trabajos futuros mediante el enfoque mesoscópico en la modelación de las biopelículas. Para ello es preciso considerar que las tasas de reproducción y muerte de los microorganismos y la velocidad específica de desprendimiento dependen de uno o varios parámetros que fluctúan temporalmente, por lo que los parámetros externos al sistema son considerados como variables aleatorias en vez de deterministas. Considerando explícitamente que las fluctuaciones internas temporales son despreciables, estos parámetros se expresan como la suma de su valor esperado y un término que representa las fluctuaciones alrededor de este valor y se sustituyen en la ecuación determinista que describe la evolución temporal de la biopelícula transformándola en una ecuación estocástica, a partir de la cual se construye la ecuación correspondiente a la función de distribución de probabilidad. Esta ecuación es resuelta aplicando los métodos estocásticos disponibles al respecto.

Por otra parte, si bien los modelos propuestos predicen que la influencia de las fluctuaciones temporales del espesor de la biopelícula en la operación estable de los filtros percoladores que se emplean a escala industrial es prácticamente despreciable, la situación puede ser completamente diferente en el caso de operación no estacionaria durante la etapa de puesta en marcha de estos equipos. En esta etapa, donde propiamente tiene lugar el desarrollo de la biomasa, se espera que en algún momento la biopelícula se encuentre en la fase de crecimiento exponencial de su evolución temporal. En este caso, los modelos estocásticos presentados predicen que las fluctuaciones se incrementan con el tiempo por lo que, bajo determinadas circunstancias, las mismas pueden generar inestabilidades que incrementen la duración de esta etapa o, en el caso más crítico, impedir que el sistema alcance el estado estable de operación, con los consiguientes problemas operativos y económicos que esto puede provocar. Conviene señalar que una situación análoga se puede presentar aún cuando el filtro se encuentre operando en estado estable, ya que el desprendimiento esporádico de grandes partículas de biomasa producto del envejecimiento de la biopelícula hace que en determinados sitios del empaque se produzca el desarrollo de biopelículas jóvenes que se espera alcancen esta fase de crecimiento y donde se pueden presentar fluctuaciones internas temporales apreciables que, a su vez, generen fluctuaciones temporales y

espaciales en la remoción de sustrato que afecten la eficiencia global del sistema.

Sin olvidar las limitaciones de los modelos estocásticos propuestos, los mismos tienen la gran ventaja de que, a diferencia de los modelos deterministas actuales de biopelícula, pueden predecir las situaciones en las cuales las fluctuaciones internas espaciales del espesor de la biopelícula pueden afectar la operación de los filtros percoladores y de otros procesos de biopelícula y buscar alternativas desde el punto de vista ingenieril que permitan disminuir los efectos de estas fluctuaciones.

FALTA PAGINA

No.

70

Anexo A. Comportamiento operativo del filtro percolador de la planta de tratamiento de aguas residuales ubicada en Ciudad Universitaria

A.1. Características generales de la planta

La planta de tratamiento de aguas residuales de la Ciudad Universitaria tiene como propósito tratar las aguas residuales provenientes de la UNAM y de la colonia Copilco el Alto, con el propósito de emplear el efluente para riego de las áreas verdes de esta institución universitaria. Aunque estas aguas son clasificadas como domésticas, parte de éstas están constituidas por las aguas residuales provenientes de laboratorios y otros centros de investigación, por lo que sus características serán ligeramente diferentes a las que se observan en las aguas residuales domésticas puras. De acuerdo con la legislación vigente en la República de México [106] la DBO_5 máxima permisible para el empleo de aguas tratadas para riego de áreas verdes es de 100 mg/L , aunque la planta fué diseñada para una DBO_5 máxima de 25 mg/L , acorde con las leyes internacionales actuales. En cuanto a la DQO, el valor máximo permisible por diseño en esta planta es de 50 mg/L , de acuerdo a lo estipulado a nivel internacional, no apareciendo datos respecto a esta variable en la legislación de este país. El tratamiento que se emplea es fundamentalmente de tipo biológico, utilizándose para ello un sistema de lodo activado, un reactor de biodiscos y un filtro percolador.

A.2. Datos de operación del filtro percolador establecidos por diseño

Tabla A.1. Datos establecidos por diseño

| Parámetro | Entrada | Salida |
|-------------------------------|---------|--------|
| $DBO_{5\text{diseño}}$ [mg/L] | 100 | 25 |
| $DQO_{\text{diseño}}$ [mg/L] | 200 | 50 |
| $Q_{\text{diseño}}$ [L/s] | 10 | 10 |

A.3. Datos históricos de operación del filtro percolador

Tabla A.2. Comportamiento de la DBO_5 en el influente (mg/L)

| Año | N | $\langle DBO_5 \rangle_e$ | $\sigma_{DBO_5e}^2$ | σ_{DBO_5e} | $\left(\frac{\sigma_{DBO_5}}{\langle DBO_5 \rangle}\right)_e$ | η_{DBO_5e} |
|------|----|---------------------------|---------------------|-------------------|---|-----------------|
| 1994 | 27 | 125 | 2336 | 48 | 0.384 | 37% |
| 1995 | 52 | 74 | 2169 | 46 | 0.621 | 77% |
| 1996 | 75 | 122 | 3028 | 55 | 0.450 | 43% |

Tabla A.3. Comportamiento de la DQO en el influente (mg/L)

| Año | N | $\langle DQO \rangle_e$ | σ_{DQOe}^2 | σ_{DQOe} | $\left(\frac{\sigma_{DQO}}{\langle DQO \rangle}\right)_e$ | η_{DQOe} |
|------|-----|-------------------------|-------------------|-----------------|---|---------------|
| 1994 | 103 | 173 | 6324 | 79 | 0.456 | 75% |
| 1995 | 92 | 187 | 12929 | 113 | 0.604 | 65% |
| 1996 | 88 | 319 | 28776 | 169 | 0.529 | 27% |

Tabla A.4. Comportamiento del flujo de operación (L/s)

| Año | N | $\langle Q \rangle$ | σ_Q^2 | σ_Q | $\left(\frac{\sigma_Q}{\langle Q \rangle}\right)$ | η_Q |
|------|-----|---------------------|--------------|------------|---|----------|
| 1994 | 103 | 8.32 | 1.13 | 1.06 | 0.12 | 100% |
| 1995 | 100 | 7.33 | 0.80 | 0.89 | 0.12 | 100% |
| 1996 | 90 | 7.74 | 0.46 | 0.67 | 0.08 | 100% |

Tabla A.5. Comportamiento de la DBO_5 en el efluente (mg/L)

| Año | N | $\langle DBO_5 \rangle_s$ | $\sigma_{DBO_5s}^2$ | σ_{DBO_5s} | $\left(\frac{\sigma_{DBO_5}}{\langle DBO_5 \rangle}\right)_s$ | η_{DBO_5s} |
|------|----|---------------------------|---------------------|-------------------|---|-----------------|
| 1994 | 27 | 22 | 195 | 14 | 0.63 | 59% |
| 1995 | 52 | 18 | 130 | 11 | 0.61 | 81% |
| 1996 | 75 | 14 | 56 | 7 | 0.50 | 96% |

Tabla A.6. Comportamiento de la DQO en el efluente (mg/L)

| Año | N | $\langle DQO \rangle_s$ | $\sigma_{DQO_s}^2$ | σ_{DQO_s} | $\left(\frac{\sigma_{DQO}}{\langle DQO \rangle}\right)_s$ | η_{DQO_s} |
|------|-----|-------------------------|--------------------|------------------|---|----------------|
| 1994 | 103 | 79 | 661 | 25 | 0.31 | 20% |
| 1995 | 92 | 76 | 3797 | 62 | 0.81 | 39% |
| 1996 | 88 | 55 | 2398 | 49 | 0.89 | 59% |

Tabla A.7. Confiabilidad de la operación y probabilidad de fallas

| Año | λ_{DBO_5} | F_{DBO_5} | λ_{DQO} | F_{DQO} |
|------|-------------------|-------------|-----------------|-----------|
| 1994 | 59% | 41% | 20% | 80% |
| 1995 | 81% | 19% | 39% | 61% |
| 1996 | 96% | 4% | 59% | 41% |

donde de acuerdo a la referencia bibliográfica [107] se tiene:

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i, \quad (\text{A.1})$$

$$\sigma_X^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2, \quad (\text{A.2})$$

$$\sigma_X = \sqrt{\sigma_X^2}, \quad (\text{A.3})$$

$$\lambda \equiv \eta, \quad (\text{A.4})$$

$$F = (100 - \eta). \quad (\text{A.5})$$

A.4. Análisis del comportamiento histórico de operación

Al analizar estos resultados se pueden plantear los siguientes hechos:

1.- La desviación típica en la DBO_5 y DQO en el influente y el efluente fue mayor a un 20% del valor esperado de estas variables, siendo menor a un 20% para el caso del flujo de agua residual.

2.- A pesar de que en todos los casos los valores esperados de la DBO_5 y DQO en el efluente fueron menores que los valores máximos permitidos, la confiabilidad del sistema fue menor del 100% en todos los casos.

3.- La desviación típica en las variables de entrada es mayor que en las variables de salida, lo que está acorde con el hecho experimentalmente comprobado de que

los filtros percoladores tienen la propiedad de amortiguar las fluctuaciones que se producen en las variables de entrada.

4.- La confiabilidad del sistema en base a la DBO_5 es mayor que la confiabilidad en base a la DQO . Este es un resultado que puede ser justificado tomando en cuenta que los filtros percoladores son sistemas de tratamiento biológico, por lo que prácticamente sólo pueden remover contaminantes biodegradables, mientras que el agua residual que se trata en esta planta tiene un determinado carácter no biodegradable conferido por los residuales provenientes de los laboratorios y otros centros de investigación de la UNAM.

Nomenclatura:

DBO_5 : Demanda bioquímica de oxígeno, representa una medida de la concentración de sustancias biodegradables presentes en el agua residual. En este caso es calculada para 5 días y $20^{\circ}C$

DQO : Demanda química de oxígeno, representa una medida de la concentración de contaminantes totales presentes en el agua residual

Q : Flujo de influente en el filtro percolador

$\langle DBO_5 \rangle$: Valor esperado de la DBO_5 [mg/L]

σ_{DBO}^2 : Varianza de la DBO_5 [mg/L]²

σ_{DBO} : Desviación típica de la DBO_5 [mg/L]

$\langle DQO \rangle$: Valor esperado de la DQO [mg/L]

σ_{DQO}^2 : Varianza de la DQO [mg/L]²

σ_{DQO} : Desviación típica de la DQO [mg/L]

$\langle Q \rangle$: Valor esperado de Q [L/s]

σ_Q^2 : Varianza de Q [L/s]²

σ_Q : Desviación típica de Q [L/s]

η_{DBO} : Frecuencia -en porciento- en que se detectó que $DBO_{5muestreada} < DBO_{5diseño}$

η_{DQO} : Frecuencia -en porciento- en que se detectó que $DQO_{muestreada} < DQO_{diseño}$

η_Q : Frecuencia -en porciento- en que se detectó que $Q_{muestreado} < Q_{diseño}$

N : Número de datos muestreados

λ : Confiabilidad de la operación

F : Probabilidad de fallas

Anexo B. Modelos tradicionales de filtros percoladores

Los modelos tradicionales que se emplean para el diseño y operación de los filtros percoladores se muestran en la tabla B.1.

Tabla B.1. Modelos tradicionales de filtros percoladores

| Modelo | Bases | Ecuaciones |
|------------------------------|-----------------------|---|
| Hanumanulu[11] | estadístico | $S_s = \frac{\{K(QS_e(1+R))^{1.19}\}}{\{(Q(1+R))^{0.78}(1+Z)^{(0.48+0.35R)x}\}} \quad (a)$ |
| NRC[10] | estadístico | $\frac{(S_e - S_s)}{S_e} = \{1.035^{(T-20)}\} \left\{ \frac{1}{1+0.443\left(\frac{S_e Q}{V F}\right)^{0.5}} \right\} \quad (b)$ |
| empírico[1] | estadístico | $\frac{(S_e - S_s)}{S_e} = \frac{\alpha}{(\alpha + \beta)} \quad (c)$ |
| Fairall[12] | estadístico | $\frac{S_s}{S_e} = K_1 \left(\frac{V(1+R)}{Q} \right)^{K_2}$ |
| de Galler[12] | estadístico | $S_s = K_1 S_e^{K_2} (1+R)^{K_3} (Q(1+R))^{K_4} (1+Z)^{K_5} T^{K_6}$ |
| 1 ^{er} Orden[1, 14] | 1 ^{er} Orden | $\frac{S_s}{S_e} = \exp \left(-K A_{esp} Z \left(\frac{Q}{A_f} \right)^{-K_1} (1.047)^{(T-20)} \right)$ |
| Kornegay[15] | biomasa | $Q(S_e - S_s) = \frac{\mu_{máx} A_{esp} \rho_f S_o}{Y(K_s + S_s)}$ |

donde:

(a) $x = r^{0.35}$

(b) $F = \frac{(1+R)}{(1+0.1R)^2}$

(c) $\alpha = (0.2) (1.047)^{(T-20)} \left(\frac{D}{v} \right)$

$\beta = \left(7.63 \frac{(S_e + R S_s)}{A_{esp}(1+R)} + 0.129 \right) 10^{-3}$

Nomenclatura:

A_{esp} : Área específica del empaque [m^2/m^3]

A_f : Área de la sección transversal del empaque [m^2]

D : Diámetro de la sección transversal del empaque [m]

$K, K_1, K_2, K_3, K_4, K_5, K_6$: Constantes determinadas experimentalmente.

K_s : Constante de saturación de Monod [kg/m^3]

Q : Flujo de residual [m^3/d]

r : Radio de la sección transversal del empaque [m]

R : Razón de recirculación

S_e : Concentración de sustrato de entrada [kg/m^3]
 S_s : Concentración de sustrato de salida [kg/m^3]
 T : Temperatura del agua residual [$^{\circ}C$]
 V : Volumen del empaque [m^3]
 Y : Coeficiente de rendimiento [kg_b/kg_s]
 Z : Profundidad del filtro [m]
 $\mu_{m\acute{a}x}$: Velocidad específica máxima de crecimiento de los microorganismos [d^{-1}]
 ρ_f : Densidad de la biomasa [kg/m^3]

Anexo C. Modelos actuales de filtro percolador

C.1. Modelos relacionados con la teoría de la biopelícula

C.1.1. Modelo de Rittmann [19]

Consideraciones: *i) la biopelícula tiene una densidad uniforme de células, ii) el espesor de biomasa es espacialmente uniforme, iii) la concentración de sustrato sólo cambia en la dirección perpendicular a la superficie de la biopelícula, iv) todas las sustancias se encuentran en exceso, excepto una que actúa como sustrato limitante, v) el transporte de sustrato en la capa límite de concentración y en el interior de la biopelícula se produce por difusión, cumpliéndose la primera ley de Fick, vi) la remoción de sustrato responde a la cinética de Monod y vii) la biopelícula se encuentra en estado estacionario.*

Ecuaciones básicas:

$$D_f \frac{d^2 S_f}{d\varepsilon^2} = \frac{\mu_{m\acute{a}x} \rho_f S_f}{Y (K_s + S_f)}, \quad (C.1)$$

$$J = \frac{D (S - S_s)}{L}, \quad (C.2)$$

$$L_f = \frac{JY}{b\rho_f}, \quad (C.3)$$

$$S_{m\acute{i}n} = \frac{K_s b}{(\mu_{m\acute{a}x} - b)}. \quad (C.4)$$

C.1.2. Modelo de Bryers [44]

Consideraciones: *i) la acumulación de biopelícula es el resultado de la deposición de los microorganismos presentes en el seno del fluido, la reproducción de biomasa y el desprendimiento por erosión, ii) la biopelícula está compuesta por diferentes especies de microorganismos, iii) la fracción de componentes abióticos es despreciable en comparación con la de los componentes bióticos, iv) la remoción de sustrato responde a la cinética de Monod y v) la velocidad de deposición*

de los microorganismos se considera proporcional a la concentración de biomasa suspendida en el seno del fluido y el área del sólido no cubierta por biomasa.

Ecuaciones básicas:

$$\frac{dM}{dt} = \sum_{j=1}^N (R_j^D + R_j^G) + R^R, \quad (C.5)$$

$$\frac{dS}{dt} = D(S - S_s) - \sum_{j=1}^N \frac{\mu_j C_j}{Y_j} + \frac{R_j^G A_{emp}}{Y_j}. \quad (C.6)$$

C.1.3. Modelo de Wanner y Gujer [26]

Consideraciones: i) se toma en cuenta la porosidad de la biopelícula, ii) la biopelícula está compuesta por diferentes especies de microorganismos, iii) la remoción de sustrato limitante responde a la cinética de Monod y iv) el transporte de sustrato se lleva a cabo por el mecanismo difusivo.

Ecuaciones básicas:

$$\epsilon_b \frac{\partial S_f}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial \epsilon} - R_s, \quad (C.7)$$

$$\frac{\partial C_x^i}{\partial t} = -\frac{\partial J_x^i}{\partial \epsilon} + R_x^i, \quad (C.8)$$

$$J_x^i = U_x C_x^i, \quad (C.9)$$

$$U_x = \frac{1}{C_{tot}} \int_0^E \sum_{i=1}^N R_x^i d\epsilon, \quad (C.10)$$

$$C_{tot} = \sum_{i=1}^N C_x^i, \quad (C.11)$$

$$\frac{dE}{dt} = (U_x)_{\epsilon=E} + U_{at} - R_d. \quad (C.12)$$

C.1.4. Modelo de Wanner y Cunningham [25, 27]

Consideraciones: i) se establece una relación entre la densidad de los componentes de la biopelícula y su concentración, ii) se toma en cuenta la producción de polímeros extracelulares, iii) la biopelícula está compuesta por diferentes especies de microorganismos, iv) se cumple la cinética de Monod y v) la transferencia de masa se lleva a cabo por el mecanismo difusivo.

Ecuaciones básicas:

$$\epsilon_b \frac{\partial S_f}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial \epsilon} - R_s, \quad (\text{C.13})$$

$$\frac{\partial C_x^i}{\partial t} = -\frac{\partial J_x^i}{\partial \epsilon} + R_x^i, \quad (\text{C.14})$$

$$J_x^i = U_x C_x^i, \quad (\text{C.15})$$

$$C_x^i = \rho_i \epsilon_i, \quad (\text{C.16})$$

$$U_x = \left(\frac{1}{(1 - \epsilon_b)} \right) \left(\frac{R_x}{\rho_f} + \frac{R_p}{\rho_p} \right), \quad (\text{C.17})$$

$$R_x = \sum_{i=1}^m R_x^i, \quad (\text{C.18})$$

$$\rho_f = \sum_{i=1}^N \rho_i, \quad (\text{C.19})$$

$$\frac{dE}{dt} = (U_x)_{\epsilon=E} + U_{at} - R_d. \quad (\text{C.20})$$

C.2. Modelos relacionados con el desprendimiento de biomasa

C.2.1. Modelo de Rittmann [31]

Consideraciones: *la velocidad del desprendimiento de biopelícula es directamente proporcional al espesor.*

Ecuación básica:

$$R_d = K_d^I E. \quad (\text{C.21})$$

C.2.2. Modelo de Wanner y Güjer [26]

Consideraciones: *se basa en el hecho experimentalmente comprobado de que la velocidad de desprendimiento es una función cuadrática del espesor de biopelícula.*

Ecuación básica:

$$R_d = K_d^{II} E^2. \quad (\text{C.22})$$

C.2.3. Modelo de Stewart [32]

Consideraciones: *el desprendimiento de biopelícula es un fenómeno probabilístico que ocurre con determinada frecuencia, y donde la cantidad de biomasa desprendida se representa mediante una variable discreta.*

Ecuación básica:

$$R_d = \int_0^E F_d (E - \epsilon_d) ad\epsilon_d. \quad (C.23)$$

donde:

$$R_d = -\frac{dE}{dt}. \quad (C.24)$$

C.3. Modelos que relacionan la remoción de sustrato en la biopelícula con la configuración del filtro percolador

El comportamiento de la concentración de sustrato con respecto a la profundidad del filtro es modelada a través de la siguiente ecuación [34]:

$$\epsilon_{emp} \frac{\partial S}{\partial t} = -v \frac{\partial S}{\partial z} + D_H \frac{\partial^2 S}{\partial z^2} - A_{esp} J - \frac{\epsilon_{emp} \mu_{máx} C_x S}{Y (K_s + S)}, \quad (C.25)$$

sujeta a las condiciones:

$$S = S_0 \text{ para } t = 0, \quad (C.26)$$

$$vS_{ent} = vS - D_H \frac{\partial S}{\partial z} \text{ para } z = 0, \quad (C.27)$$

$$\frac{\partial S}{\partial z} = 0 \text{ para } z = Z, \quad (C.28)$$

donde:

$$D_H = 0.67 D_{emp} + 0.65 d_p v \left(1 + 0.67 \left(\frac{D_{emp}}{d_p v} \right)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (C.29)$$

Nomenclatura:

a : Área de la partícula desprendida [L^2]

A_{esp} : Área específica del empaque [L^{-1}]

b : Velocidad específica de muerte de los microorganismos [t^{-1}]

C_j : Concentración de microorganismos suspendidos de la especie j [$M_j L^{-3}$]

C_{tot} : Concentración total de biomasa [$M_x L^{-3}$]

C_x : Concentración de microorganismos suspendidos [$M_x L^{-3}$]

C_x^i : Concentración de la especie i de microorganismos en la biopelícula [$M_x^i L^{-3}$]

- D : Difusividad del sustrato en el seno del fluido [L^2t^{-1}]
 D_{emp} : Diámetro de la sección transversal del empaque [L]
 D_f : Difusividad del sustrato en el interior de la biopelícula [L^2t^{-1}]
 D_H : Coeficiente de dispersividad hidrodinámica [$t^{-1}L^5M_s^{-1}$]
 d_p : Diámetro equivalente de las partículas del empaque [L]
 E : Espesor total de la biopelícula [L]
 F_d : Frecuencia o probabilidad por unidad de tiempo de que tenga lugar el desprendimiento a una determinada profundidad de la biopelícula [t^{-1}]
 J : Flux de sustrato removido [$M_sL^{-2}t$]
 J_x^i : Flux de biomasa de la especie i perpendicular a la superficie del empaque [$M_x^iL^{-2}t^{-1}$]
 K_d^I : Constante de velocidad específica de desprendimiento de primer orden [t^{-1}]
 K_d^{II} : Constante de velocidad específica de desprendimiento de segundo orden [$t^{-1}L^{-1}$]
 K_s : Constante de saturación de Monod [M_sL^3]
 L : Espesor de la capa límite de concentración del líquido [L]
 L_f : Espesor de la biopelícula en estado estacionario [L]
 M : Masa total de la biopelícula [M]
 N : Número de especies de microorganismos presentes
 R_d : Velocidad de desprendimiento [Lt^{-1}]
 R_j^D : Velocidad de deposición de los microorganismos suspendidos de la especie j [Mt^{-1}]
 R_j^G : Velocidad de crecimiento de los microorganismos atrapados de la especie j [Mt^{-1}]
 R_p : Velocidad de crecimiento de los polímeros extracelulares [$M_pL^{-3}t^{-1}$]
 R^R : Velocidad de desprendimiento de la biomasa [Mt^{-1}]
 R_s : Velocidad de remoción de sustrato por los microorganismos [$M_sL^{-3}t^{-1}$]
 R_x : Velocidad total de crecimiento de la biomasa [$M_xL^{-3}t^{-1}$]
 R_x^i : Velocidad de crecimiento de la especie i [$M_x^iL^{-3}t^{-1}$]
 S : Concentración de sustrato en el agua residual [M_sL^{-3}]
 S_f : Concentración de sustrato en el interior de la biopelícula [M_sL^3]
 S_{min} : Concentración de sustrato mínima para poder tener una biopelícula que alcance el estado estacionario [M_sL^3]
 S_s : Concentración de sustrato en la superficie de la biopelícula [M_sL^3]
 t : Tiempo [t]
 U_{at} : Velocidad de atrapamiento de los microorganismos [$t^{-1}L$]
 U_x : Velocidad de desplazamiento de la biomasa desde la superficie del empaque [$t^{-1}L$]
 Y : Coeficiente de rendimiento [$M_bM_s^{-1}$]
 Y_j : Coeficiente de rendimiento de la especie j [M_bM_s]
 z : Profundidad del filtro [L]
 ϵ_b : Porosidad de la biopelícula
 ϵ_{emp} : Porosidad del empaque

- ϵ_i : Fracción en volumen de la especie i
 ϵ : Espesor de la biopelícula [L]
 ϵ_d : Profundidad a la que tiene lugar el desprendimiento [L]
 μ_j : Velocidad específica de crecimiento de los microorganismos suspendidos de la especie j [t^{-1}]
 $\mu_{m\acute{a}x}$: Velocidad específica máxima de crecimiento [t^{-1}]
 ρ_f : Densidad de la biomasa [$M_b L^{-3}$]
 ρ_i : Densidad de la especie i [$M_x^i L^{-3}$]
 ρ_p : Densidad de los polímeros extracelulares [$M_p L^{-3}$]
 v : Flujo de agua residual por área de sección transversal del empaque [$L t^{-1}$]

Anexo D. Métodos experimentales desarrollados para el estudio de las biopelículas

Propiedades de las biopelículas que se determinan experimentalmente:
i) espesor y estructura interna, ii) cantidad total de biopelícula, iii) composición química y biológica, iv) actividad metabólica de los microorganismos y v) dinámica de la comunidad de microorganismos.

Métodos experimentales:

Métodos destructivos: Implican la remoción de la biopelícula de la superficie del sólido y la destrucción de su estructura interna. Incluyen los métodos gravimétricos, químicos, bioquímicos, conteo de microorganismos y espectrofotométricos.

Métodos no destructivos: Comprenden el estudio y observación directa de la biopelícula a través del empleo de la microscopía.

Cada una de estas propiedades y los métodos más comúnmente empleados para su medición aparecen en la tabla D.1.

Tabla D.1. Métodos experimentales empleados para el estudio de las biopelículas [49]-[52]

| Propiedad | Métodos |
|---|---------------------------------|
| <i>1) Espesor y estructura interna</i> | microscopía óptica |
| | microscopía CSLM ^(a) |
| | microscopía SEM ^(b) |
| | microscopía SEMi ^(c) |
| | microscopía TEM ^(d) |
| <i>2) Cantidad total de biopelícula</i> | |
| Peso seco | gravimétricos |
| Carbono orgánico total | químicos |
| Demanda química de oxígeno | químicos |
| Demanda bioquímica de oxígeno | biológicos |
| <i>3) Composición</i> | |
| Polímeros extracelulares | colorimétricos |
| Proteínas | método de Lowry |
| Cantidad de microorganismos | conteo |
| <i>4) Actividad</i> | |
| Remoción de sustrato | químicos |
| Consumo de oxígeno | químicos |
| Cantidad de ATP | bioquímicos |
| <i>5) Dinámica de la población</i> | |
| Medición de ADN | espectrofotométricos |
| Medición de ARN | espectrofotométricos |

(a): Confocal Scanning Laser Microscopy.

(b): Scanning Electron Microscopy.

(c): Scanning Electron Micrographs.

(d): Transmission Electron Microscopy.

- [1] Chudoba J., Menéndez C., Pérez J. 1986. *Fundamentos teóricos de algunos procesos para el tratamiento de aguas residuales*. ISPJAE, La Habana, Cuba.
- [2] Klemetson S., Rogers G. 1982. The future of biological fixed film processes and their application to environmental problems. *First International Conference on fixed-film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [3] Hamoda M. 1993. Behavior of a biological fixed film system treating toxic and nontoxic organic wastes. *Wat. Sci. Technol.*, **28**:155-163.
- [4] Howell J., Atkinson B. 1976. Sloughing of microbial film in trickling filter. *Wat. Res.*, **10**:307-315.
- [5] Sampayo F. 1982. The use of plastic media trickling filter: Two case histories. *First International Conference on fixed-film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [6] Parck Y., Davis M., Wallis D. 1984. Analysis of a continuous, aerobic, fixed-film reactor. I.- Steady-state behavior. *Biotechnol. Bioeng.*, **26**:457.
- [7] Bruce A., Boon G. 1975. Aspect of high rate biological treatment of domestic and industrial wastewater. *JWPC*, **70**:2518.
- [8] Lierhif B., Toye D., Marchot P., Crine M. 1994. Interactions between the biofilm growth and the hydrodynamics in an aerobic trickling filter. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:423-430.

- [9] Schroeder E. 1982. Trickling filter: Reliability, stability and potential performance. *First International Conference on fixed-film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [10] Hammer M. 1970. *Water and Waste technology*. ISPJAE, La Habana, Cuba.
- [11] Hanumanulu V. 1971. Performance of deep trickling filter by five methods. *JWPCF*, **43**:2060.
- [12] Robertson P., Wilson O. 1968. Statistical comparison of trickling filter equation using paper mill effluent data. *JWPCF*, **40**:1960.
- [13] Shulze K. 1970. Load and efficiency of trickling filter. *JWPCF*, **32**:1318-1324.
- [14] Eckenfelder W., Bornhart E. 1963. Performance of high rate trickling filter using selected media. *JWPCF*, **35**:931-942.
- [15] Wanielista M., Keinath T. 1975. *Mathematical modeling for water pollution control*. ISPJAE, La Habana.
- [16] Grady L. Jr. 1982. Modeling of biological fixed film. A state of the art review. *First International Conference on fixed film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [17] Sheldon F., Hanf E. 1982. Selection and optimization protocols for attached biological packed columns. *First International Conference on fixed film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [18] Quirek T., Eckenfelder W. 1982. Scale-up and process analysis techniques for plastic media trickling filter. *First International Conference on fixed film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.

- [19] Rittmann B. 1982. Comparative performance of biofilm reactor types. *Biotechnol. Bioeng.*, **24**:1341-1370.
- [20] Rittmann B., McCarty P. 1980. Model of steady-state biofilm kinetics. *Biotechnol. Bioeng.*, **22**:2343-2357.
- [21] Arcury E., Donaldson T. 1981. Biofilm kinetics. *Biotechnol. Bioeng.*, **23**:2149-2149.
- [22] Lewandowski Z., Walser G., Characklis W. 1991. Reaction kinetics in biofilm. *Biotechnol. Bioeng.*, **37**:877-885.
- [23] van Ede C., Bellen A. 1993. Analytical effectiveness calculations concerning the degradation of an inhibitive substrate by steady-state biofilm. *Biotechnol. Bioeng.*, **42**:267-278.
- [24] Kishimoto T. 1991. A fundamental study of wastewater treatment by a biofilm. *Int. Chem. Eng.*, **31**:501-510.
- [25] Wanner O., Cunningham L. 1995. Modeling biofilm processes in porous media. *Biotechnol. Bioeng.*, **47**:699-702.
- [26] Wanner O., Güjer W. 1986. A multispecies biofilm model. *Biotechnol. Bioeng.*, **28**:314-328.
- [27] Wanner O., Cunningham A., Lundman R. 1995. Modeling biofilm accumulation and mass transport in porous medium under high substrate loading. *Biotechnol. Bioeng.*, **47**:703-712.
- [28] Wanner O., Reichert P. 1996. Mathematical modeling of mixed-culture biofilm. *Biotechnol. Bioeng.*, **49**:172-184.

- [29] Rittmann B., Manem J. 1992. Development and experimental evaluation of a steady-state multispecies biofilm model. *Biotechnol. Bioeng.*, **39**:914-922.
- [30] Rittmann B., McCarty P. 1980. Evaluation of steady-state biofilm kinetics. *Biotechnol. Bioeng.*, **22**:2359-2373.
- [31] Rittmann B. 1982. The effect of shear stress on biofilm loss rate. *Biotechnol. Bioeng.*, **24**:501-506.
- [32] Stewart P. 1993. A model of biofilm detachment. *Biotechnol. Bioeng.*, **41**:111-117.
- [33] Peyton B., Characklis W. 1992. Kinetics of biofilm detachment. *Wat. Sci. Technol.*, **26**:1995-2004.
- [34] Bear J. 1972. *Dynamics of fluid in porous media*. Elsevier, Nueva York.
- [35] Zhang S., Huck P. 1996. Parameter estimation for biofilm processes in biological water treatment. *Wat. Res.*, **30**:456-464.
- [36] Wirtel S., Noguera D., Kampmeier D., Heath M., Rittmann B. 1992. Explaining widely varying biofilm process performance with normalized loading curves. *Wat. Env. Res.*, **64**:706-711.
- [37] Heath M., Wirtel S., Rittmann B. 1990. Simplified design of biofilm processes using normalized loading curves. *JWPCF*, **62**:185-192.
- [38] Hinton S., Stensel H. 1991. Experimental observation of trickling filter hydraulic. *Wat. Res.*, **25**:1389-1394.
- [39] Bau R. 1982. The effects of hidraulic variation on fixed film reactor performance. *First International Conference on fixed film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.

- [40] Sundstrom D., Klei H., Quinlan J. 1983. Response of composition in biological reactors to changes in inlet concentration. *Biotechnol. Bioeng.*, **25**:857-861.
- [41] Wilderer P., Hartmann L., Nahrgang T. 1982. Importance of ecological considerations on desing and operations of trickling filter. *First International Conference on fixed film biological processes*. Kings Island, Ohio, EEUU.
- [42] Vavilin V., Vasiliev V. 1984. Experiments with an ecosystem adaptation model of biological treatment. *Biotechnol. Bioeng.*, **26**:1042-1053.
- [43] Charng G., Huang J. 1994. Effect of biofilm thickness distribution on substrate inhibited kinetic. *Wat. Res.*, **28**:967-973.
- [44] Bryers J. 1984. Biofilm formation and chemostat dynamics: Pure and mixed culture considerations. *Biotechnol. Bioeng.*, **26**:948-958.
- [45] Characklis W. 1981. Fouling biofilm development: A process analysis. *Biotechnol. Bioeng.*, **23**:1923-1960.
- [46] Srinivasan R., Stewart P., Griebe T., Ching I., Xu X. 1996. Biofilm parameters influencing biocide efficacy. *Biotechnol. Bioeng.*, **49**:553-560.
- [47] Stewart P., Hamilton M., Goldstein B., Schneider B. 1996. Modeling biocide action against biofilm, *Biotechnol. Bioeng.*, **49**:445-455.
- [48] Tashiro H. 1991. Penetration of biocides into biofilm. *Wat. Sci. Technol.*, **23**:1395-1402.
- [49] Lazarova V., Pierzo V., Fontvielle D., Manem J. 1994. Integrated approach for biofilm characterization and biomass activity control. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:345-354.

- [50] Lazarova V., Manem J. 1995. Characterization and activity analysis in water and wastewater treatment. *Wat. Res.*, **29**:2227-2245.
- [51] Clesceri L., Greenberg A., Trussell R., (Ed.). 1989. *Standard methods for the examination of water and wastewater*. 17th Edn. Am. Pobl. Hlth. Ass., Washington D.C., EEUU.
- [52] Bakke R., Olsson P. 1986. Biofilm thickness measurements by light microscopy. *J. Microbial Meth.*, **5**:93-99.
- [53] Stewart P., Murga R., Srinivasan R., de Beer D. 1995. Biofilm structural heterogeneity visualized by three microscopic methods. *Wat. Res.*, **29**:2006-2009.
- [54] Zhang T., Bishop P. 1995. Structure, activity and composition of biofilm. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:335-344.
- [55] Gjaltema A., Arts P., van Loosdrecht M., Kuenen J., Heijnen J. 1994. Heterogeneity of biofilm in rotating annular reactors: Occurrence, structure and consequences. *Biotechnol. Bioeng.*, **44**:194-204.
- [56] de Beer D., Stoodley P., Roe F., Lewandowski Z. 1994. Effects of biofilm structures on oxygen distribution and mass transport. *Biotechnol. Bioeng.*, **43**:1131-1138.
- [57] Natuscka M., Welander T. 1994. Influence of predators on nitrification in aerobic biofilms processes. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:355-363.
- [58] de Beer D., Stoodley P., Lewandowski F. 1994. Liquid flow in heterogeneous biofilms. *Biotechnol. Bioeng.*, **44**:630-641.
- [59] Drurg W., Stewart P., Characklis W. 1993. Transport of 1- μ m latex particles in *P. aeruginosa* biofilm. *Biotechnol. Bioeng.*, **42**:111-117.

- [60] Zhang T., Bishop P. 1994. Density, porosity and pore structure of biofilm. *Wat. Res.*, **28**:2267-2277.
- [61] Zhang T., Bishop P. 1994. Evaluation of tortuosity factors and effective diffusivities in biofilm. *Wat. Res.*, **28**:2279-2287.
- [62] Robinson J., Trulear M., Characklis W. 1984. Cellular reproduction and extracellular polymer formation by *P. aeruginosa* in continuous culture. *Biotechnol. Bioeng.*, **26**:1409-1417.
- [63] Tsuchido T., Shisasaki I. 1980. Kinetics of microbial death by combined treatment with heat and antimicrobial agents. *Biotechnol. Bioeng.*, **22**:107-118.
- [64] Fruhen C., Gtjer W., Wanner O. 1991. Significance of spatial distribution on microbial species in mixed culture biofilm. *Wat. Sci. Technol.*, **23**:1365-1374.
- [65] Luna-Pabello V. M., 1993, *Estudio comparativo de las poblaciones de protozoarios ciliados en un reactor de biodiscos alimentado con diferentes substratos*. Tesis doctoral, U.N.A.M., Facultad de Ciencias, México D. F. México.
- [66] Zhang T., Fu Y., Bishop P. 1994. Competition in biofilms. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:263-270.
- [67] Zhang C., Yun Cheng F., Bishop P. 1995. Competition for substrate and space in biofilms. *Wat. Env. Res.*, **67**:1002-1012.
- [68] Cao Y., Alaerts J. 1995. Influence of reactor type and shear stress on aerobic biofilm: Morphology, population and kinetics. *Wat. Res.*, **29**:107-118.
- [69] Trulear M., Characklis W. 1982. Dynamics of biofilm processes. *JWPCF*, **54**:1288-1301.

- [70] Lewandowski Z., Stoodley P., Altobelli S., Furushima E. 1994. Hydrodynamics and kinetics in biofilm systems: Recent advances and new problems. *Wat. Sci. Technol.*, **29**:223-229.
- [71] Duddridge J., Kent C., Laws J. 1982. Effect of surface shear stress on the attachment of *P. fluorescens* to stainless steel under defined flow conditions. *Biotechnol. Bioeng.*, **24**:153-164.
- [72] Shreve G. 1991. Development of pure culture biofilm of *P. putida* on solid supports. *Biotechnol. Bioeng.*, **37**:512-518.
- [73] Powell M., Slater N. 1983. The deposition of bacterial cells from laminar flows onto solid surfaces. *Biotechnol. Bioeng.*, **25**:891-900.
- [74] Bryers J. 1982. Processes involved in early biofilm formation. *First International Conference on fixed film biological processes*, Kings Island, Ohio, EEUU.
- [75] Tjihuis L., van Loosdrecht C., Heijnen J. 1995. Dynamics of biofilm detachment in biofilm airlift suspension reactors. *Biotechnol. Bioeng.*, **45**:481-487.
- [76] Rao Bhamidimarri S., See T. 1992. Shear loss characteristics of an aerobic biofilm, *Wat. Sci. Technol.*, **26**:595-600.
- [77] Applegate P., Bryers J. 1991. Effects of carbon and oxygen limitations and calcium concentration on biofilm removal processes. *Biotechnol. Bioeng.*, **37**: 17-24.
- [78] Murga R., Stewart P., Don Daly D. 1995. Quantitative analysis of biofilm thickness variability. *Biotechnol. Bioeng.*, **45**:503-510.
- [79] Siebel M., Characklis W. 1991. Observations of binary population biofilms. *Biotechnol. Bioeng.*, **37**:778-779.

- [80] Peyton B. 1996. Effects of shear stress and substrate loading rate on *P. aeruginosa* biofilm thickness and density. *Wat. Res.*, **30**:29-36.
- [81] Logan B., Dettmer J. 1989. Increased mass transfer to microorganisms with fluid motion. *Biotechnol. Bioeng.*, **34**:1135-1144.
- [82] Lewandowski Z., Altobelli S., Majors P., Furushima E. 1992. NMR imaging of hydrodynamics near microbiology colonized surfaces. *Wat. Sci. Technol.*, **26**:577-584.
- [83] Larsen T., Harremoes P. 1994. Degradation mechanisms of colloidal organic matter in biofilm reactor. *Wat. Res.*, **28**:2279-2287.
- [84] Yang S., Lewandowski F. 1995. Measurement of local mass transfer coefficient in biofilm. *Biotechnol. Bioeng.*, **48**:737-744.
- [85] Bishop P., Zhang T., Yun Chang F. 1995. Effects of biofilm structure microbial distributions and mass transport on biodegradation processes. *Wat. Sci. Technol.*, **31**:143-152.
- [86] Fruhen M. 1991. Significance of spacial distribution of microbial species in mixed culture biofilm. *Wat. Sci. Technol.*, **23**:1365-1380.
- [87] Vassel J., Schrobitten P. 1991. Oxygen transfer in trickling filters. *Wat. Res.*, **25**:53-63.
- [88] Flora J., Suidan M., Bisna P., Sayles G. 1995. A modeling study of anaerobic biofilm systems: I.- Detailed biofilm modeling. *Biotechnol. Bioeng.*, **46**:43-53.
- [89] Lewandowski Z., Stoodley P., Altobelli S. 1995. Experimental and conceptual studies on mass transport in biofilms. *Wat. Sci. Technol.*, **31**:153-162.

- [90] Chen Y., Bungay H. 1981. Microelectrode studies of oxygen transfer in trickling filter slimes. *Biotechnol. Bioeng.*, **23**:781-792.
- [91] Nijhof M., Klapwijk K. 1995. Diffusional transport mechanisms and biofilm nitrification characteristics influencing nitrite levels in nitrifying trickling filter effluents. *Wat. Res.*, **29**:2287-2292.
- [92] Gardiner C. 1985. *Handbook of stochastic methods*. capítulo 1, Springer, Berlín, Rep. Fed. Alemania.
- [93] Haken H. 1975. Cooperative effects in systems far from thermal equilibrium and in nonphysical systems. *Rev. Mod. Phys.*, **47**:67.
- [94] Fan L. T., Shen B., Chou S. 1991. Stochastic modeling of transient residence time distributions during start-up. *Chem. Eng. Sci.*, **50**:211-221.
- [95] Chou S., Fan L., Nassar R. 1988. Modeling of complex chemical reactions in a continuous flow reactor: A Markov chain approach. *Chem. Eng. Sci.*, **43**:2807-2815.
- [96] Rodríguez-Salinas E., Rodríguez R. F., Soria A., Aquino N. 1998. Volume fraction autocorrelation functions in a two phase bubble column. *Int. J. Multiphase Flow*, **24**:93-108.
- [97] Argyriou D., Harvey L., Shimnar R. 1971. Bubble growth by coalescence in gas fluidized beds. *AIChE Journal*, **10**:122.
- [98] Rodríguez R. F., Cruz J., Pérez R. 1993. Descripción estocástica de procesos de transporte a través de medios porosos. *Avances en Ingeniería Química*, 99-103.
- [99] van Dongen P., Ernst M. 1987. *J. Stat. Phys.*, **49**:927.

- [100] Doi M., Edwards S. 1986. *The theory of polymer dynamics*. Clarendon Press, Oxford, Inglaterra.
- [101] Ávalos J., Rubí J., Rodríguez R. F. 1996. Light scattering from suspensions under external gradients. *Physics Review*, **41**:1923.
- [102] van Kampen N. G. 1992. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Elsevier, Amsterdam, Holanda.
- [103] Khinchin K. 1949. *Mathematical foundations of statistical mechanics*. Dover, Nueva York, EEUU.
- [104] Feller W. 1968. *An introduction to probability theory and its applications*. Wiley, Vol. 1, Nueva York, EEUU.
- [105] Zwanzing R. 1965. *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **16**:67.
- [106] Norma Oficial Mexicana, 1996, *Diario Oficial, NOM-001-ECOL-1996, Secretaría de Medio Ambiente, Recursos Naturales y Pesca*, México, D.F., México.
- [107] Billinton R., Allan R., 1992, *Reliability evaluation of engineering systems*, capítulo 11, Plenum Press, Nueva York, EEUU.