



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.**

POSGRADO EN CIENCIAS AMBIENTALES

**Diseño y modelado de un reactor tubular de
lecho empacado para la desinfección de
biosólidos durante el compostaje**

Tesis que presenta

Raúl Israel Renteria Tamayo

Para obtener el grado de

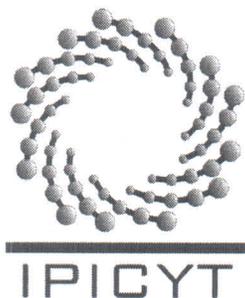
Maestro en Ciencias Ambientales

Codirectores de Tesis

Dr. Felipe Alatraste Mondragón

M. en C. Guillermo Vidriales Escobar

San Luis Potosí, S.L.P., Septiembre del 2013



Constancia de aprobación de la tesis

La tesis "*Diseño y modelado de un reactor tubular de lecho empacado para la desinfección de biosólidos durante el compostaje*" presentada para obtener el Grado de Maestro en Ciencias Ambientales fue elaborada por **Raúl Israel Rentería Tamayo** y aprobada el **cuatro de septiembre del dos mil trece** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Ciencias Ambientales del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Dr. Felipe Alatriste Mondragón
Director de la tesis

M. en C. Guillermo Vidriales Escobar
Director de la tesis

Dr. Elías Razo Flores
Miembro del Comité Tutorial

Dr. Omar González Ortega
Miembro del Comité Tutorial



Créditos Institucionales

Esta tesis fue elaborada en los Laboratorios de la División de Ciencias Ambientales del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la codirección del Dr. Felipe Alatraste Mondragón y el M. en C. Guillermo Vidriales Escobar.

Parte de esta tesis fue elaborada en el Laboratorio Nacional de Biotecnología Agrícola, Médica y Ambiental del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (110500) y del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.



Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Acta de Examen de Grado

El Secretario Académico del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., certifica que en el Acta 004 del Libro Primero de Actas de Exámenes de Grado del Programa de Maestría en Ciencias Ambientales está asentado lo siguiente:

En la ciudad de San Luis Potosí a los 4 días del mes de septiembre del año 2013, se reunió a las 10:00 horas en las instalaciones del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., el Jurado integrado por:

Dr. Elías Razo Flores	Presidente	IPICYT
Dr. Omar González Ortega	Secretario	UASLP
Dr. Felipe Alatraste Mondragón	Sinodal	IPICYT
M. en C. Guillermo Vidriales Escobar	Sinodal	IPICYT

a fin de efectuar el examen, que para obtener el Grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS AMBIENTALES

sustentó el C.

Raúl Israel Rentería Tamayo

sobre la Tesis intitulada:

Diseño y modelado de un reactor tubular de lecho empacado para la desinfección de biosólidos durante el compostaje

que se desarrolló bajo la dirección de:

Dr. Felipe Alatraste Mondragón
M. en C. Guillermo Vidriales Escobar

El Jurado, después de deliberar, determinó

APROBARLO

Dándose por terminado el acto a las 12:30 horas, procediendo a la firma del Acta los integrantes del Jurado. Dando fe el Secretario Académico del Instituto.

A petición del interesado y para los fines que al mismo convengan, se extiende el presente documento en la ciudad de San Luis Potosí, S.L.P., México, a los 30 días del mes de agosto de 2013.


Dr. Marcial Bonilla Marín
Secretario Académico


Mtra. Ivonne Lizette Cuevas Vélez
Jefa del Departamento del Posgrado

Dedicatorias

El presente trabajo está dedicado a mi familia, en especial a mi madre Olga Tamayo Amaro y mi esposa Faviola Avalos, quienes me motivan a seguir adelante.

Agradecimientos

Al M. en C. Josué Delgado Balbuena y el Dr. José Tulio Arredondo Moreno por su apoyo técnico e instrumental relacionado con el registro continuo de temperatura.

A los técnicos de la división M. en C. Dulce Isela de Fátima Partida Gutiérrez, y M. en C. Juan Pablo Rodas Ortíz por su apoyo técnico.

A la Q. F B. Elvira González Rico por su apoyo técnico en la determinación de coliformes.

Al Ing. Juan Manuel Olvera y todo el personal de la PTAR Tangamanga 1 por proporcionar el material de trabajo.

Al personal de mantenimiento Felipe de Jesús Martínez Ibarra, Iván de Jesús Zúñiga Hernández y Juan Ramón Ibarra por su apoyo instrumental en la construcción del reactor.

Al I.Q. Laura Moreno Morales por su asesoría técnica del compostaje y por su apoyo profesional en las presentaciones referentes al presente trabajo.

Al Dr. Luis Felipe Cházaro Ruiz, al Dr. Vladimir Escobar Barrios, a la Dra. Sonia Lorena Arriaga García y a la Dra. Elisabeth Huber- Sannwald por su apoyo académico y por contribuir de manera sustancial en mi formación personal y profesional.

A CONACYT por el soporte financiero del Programa Estímulos a la Innovación (CONACYT-PROAGUA), Proyecto No. 156188. “Estudio de la producción a nivel planta piloto de composta a partir de biosólidos y materiales lignocelulósicos y su uso agroindustrial como una alternativa para el problema de confinamiento bajo la Norma NOM-004-SEMARNAT”.

Contenido

CONSTANCIA DE APROBACIÓN DE LA TESIS	II
CRÉDITOS INSTITUCIONALES	III
ACTA DE EXAMEN	IV
DEDICATORIAS	V
AGRADECIMIENTOS	VI
LISTA DE FIGURAS	IX
LISTA DE TABLAS	XIII
ABSTRACT.....	XV
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Problemática.....	1
1.2. Estabilización de lodos residuales	1
1.3. Estado del arte del modelado matemático del compostaje.....	3
1.3.1. Planteamiento de modelos matemáticos	3
1.3.2. Reactores y modelos cinéticos.....	4
1.3.2.1. Modelo cinético de primer orden.....	4
1.3.2.2. Modelo cinético de Contois.....	7
1.3.2.3. Modelo cinético de primer orden para compuestos de lenta y rápida biodegradación	10
1.4. Antecedentes.....	12
1.4.1. Generación y aprovechamiento de biosólidos	12
1.4.2. Trabajos previos de compostaje de biosólidos en la PTAR Tangamanga I	13
1.5. Justificación	17
1.6. Hipótesis	17
1.7. Objetivos.....	18
1.7.1. Objetivos generales	18
1.7.2. Objetivos específicos	18
2. METODOLOGÍA	19
2.1. Algoritmo de la metodología.....	19
2.2. Criterios de diseño del sistema experimental	21
2.2.1. Análisis de la dispersión en un reactor tubular	21
2.2.2. Ecuaciones de diseño.....	23
2.2.2.1. Balance de masa para el agua	23
2.2.2.2. Balance de masa para el oxígeno	23

2.2.2.3. Balance de energía.....	23
2.3. Análisis e implementación del sistema experimental.....	24
2.3.1. Construcción del reactor	24
2.3.2. Obtención de los parámetros de diseño	26
2.4. Desarrollo de un modelo matemático del proceso de compostaje basado en el transporte de calor y masa en estado no estacionario... 28	
2.4.1. Descripción del modelo.....	28
2.4.2. Consideraciones	30
2.4.3. Balances de materia y energía sobre un elemento diferencial .. 31	
2.4.3.1. Balance de masa para el oxígeno	31
2.4.3.2. Balance de energía para la fase compuesta (sólido-líquido) . 32	
2.4.3.3. Balance de energía para la fase gaseosa	33
2.4.4. Modelo cinético	34
2.5. Solución numérica del modelo	36
2.5.1. Método explícito de diferencias finitas (MDF)	36
2.5.2. Método de diferencias finitas acoplado con el método de integración de Runge-Kutta de 4 ° orden (MDF-RK4).....	38
2.6. Análisis de sensibilidad.....	41
2.7. Ajuste de parámetros	42
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	43
3.1. Diseño del sistema experimental.....	43
3.1.1. Retos de diseño.....	43
3.1.2. Obtención del coeficiente global de transferencia de calor U y de la entalpía de reacción H_{rx}	43
3.1.3. Simulación de las ecuaciones de diseño.....	46
3.1.4. Comparación de los modelos cinéticos.....	49
3.2. Construcción del sistema experimental.....	50
3.3. Discretización y simulación de las ecuaciones de transferencia	54
3.4. Análisis de sensibilidad.....	58
3.5. Funcionamiento del reactor y ajuste de parámetros	60
3.6. Remoción de coliformes fecales	70
4. CONCLUSIONES	72
PERSPECTIVAS.....	73
REFERENCIAS.....	75
APÉNDICES	79

Lista de Figuras

Número	Titulo	Página
1.1	Reactor de flujo horizontal (Richard, 1997)	5
1.2	Interpolación múltiple para $k_{o_2}(\langle W \rangle^s, T)$, (Richard, 1997)	7
1.3	Sistema semi-abierto (Nakayama et al., 2007)	8
1.4	$\mu(\langle W \rangle^s, T)$ para una fracción de humedad a una cierta temperatura en el sólido	10
1.5	Comportamiento de k_d en función de la temperatura (Haug, 1980)	11
1.6	Microcosmos en invernadero (Gómez Tovar, 2007)	13
1.7	Disminución de coliformes fecales durante el proceso de compostaje para la estabilización de biosólidos (Gómez Tovar, 2007)	14
1.8	Sistema de compostaje abierto: a) Sistema de aireación y b) pilas de composta de una tonelada (Alatraste et al., 2011)	15
1.9	Velocidad de flujo medida en las cuatro pilas de composta (Alatraste et al., 2011)	16
1.10	Temperatura observada en los puntos centrales referentes a la parte inferior y superior de las cuatro pilas (Alatraste et al., 2011)	16
2.1	Diagrama de flujo de la metodología seguida	20
2.2	Solución analítica del modelo de dispersión en z en estado estacionario	22

2.3	Esquema del sistema experimental	25
2.4	Elemento diferencial	28
2.5	Funcionalidades del modelo cinético	35
2.6	Maya computacional resuelta por MDF	38
2.7	Maya computacional resuelta por MDF-RK4	40
3.1	Determinación experimental de U	45
3.2	Simulación de la temperatura obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de energía (ecuación de diseño)	47
3.3	Simulación de la concentración de oxígeno obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de masa para el oxígeno (ecuación de diseño).	48
3.4	Simulación del contenido de humedad obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de masa para el oxígeno (ecuación de diseño)	48
3.5	Simulación de la temperatura obtenida con el balance de energía (ecuación de diseño) acoplado con el modelo cinético de primer orden (Modelo # 1), Modelo cinético de Contois (Modelo # 2) y Modelo cinético de primer orden para compuestos de lenta y rápida generación (Modelo # 3)	49
3.6	Comparación de la simulación obtenida con el Modelo # 2 y los datos experimentales	50
3.7	Evolución del sistema experimental	50
3.8	Comparación de los datos experimentales con el Modelo # 2	51
3.9	Perfil de temperaturas a lo largo del reactor. Los números indican la distancia (m) entre los puntos de muestreo, desde la entrada en	52

$L=0.0$ m hasta la salida en $L=3.0$ m

3.10	Evolución de la temperatura en diferentes posiciones axiales dentro del reactor sin composta	53
3.11	Oscilación de la temperatura a la entrada al reactor; experimento #2 efecto sin amortiguar, experimento #3 efecto amortiguado	54
3.12	Simulación arrojada por el modelo resuelto por el MDF	55
3.13	Simulación arrojada por el modelo resuelto por el MDF–RK4	57-58
3.14	Desviación estándar (DS) para la concentración de oxígeno, dada una variación máxima (V_{max}) y mínima (V_{min}) en los parámetros del modelo	59
3.15	Desviación estándar (DS) para la temperatura, dada una variación máxima (V_{max}) y mínima (V_{min}) en los parámetros del modelo	59
3.16	Comparación axial de temperatura durante el experimento # 1	61
3.17	Comparación axial de temperatura durante el experimento # 2	62
3.18	Comparación axial de temperatura durante el experimento # 3	62
3.19	Comparación radial de temperatura durante el experimento # 1	63
3.20	Comparación radial de temperatura durante el experimento # 2	63
3.21	Comparación radial de temperatura durante el experimento # 3	64
3.22	Aproximación del modelo al experimento # 1 para el contenido de oxígeno a la salida del	66

	reactor en $L=2.7$ m.	
3.23	Aproximación del modelo al experimento # 2 para el contenido de oxígeno a la salida del reactor en $L=1.6$ m.	66
3.24	Aproximación del modelo al experimento # 3 para el contenido de oxígeno a la salida del reactor en $L=1.6$ m	67
3.25	Aproximación del modelo al experimento # 1 para la temperatura del lecho en $L=0.85$ m.	68
3.26	Aproximación del modelo al experimento # 2 para la temperatura del lecho en $L=1.30$ m.	68
3.27	Aproximación del modelo al experimento # 3 para la temperatura del lecho en $L=1.30$ m.	69
3.28	Modelación de la distribución espacial de temperatura a través de la columna del reactor	70

Lista de Tablas

Numero	Titulo	Página
1.1	Composición de las pilas de composta (Alatríste et al., 2011)	15
2.1	Parámetros de diseño del reactor	23
2.2	Parámetros del modelo para el análisis de sensibilidad	41
2.3	Ajuste de parámetros	42
3.1	Aislamiento térmico	44
3.2	Calor de reacción	46
3.3	Determinación del tamaño de paso y número de divisiones	58
3.4	Condiciones de operación	62
3.5	Parámetros obtenidos del ajuste	66
3.6	Presencia de coliformes en la composta	73
1.1.A	k_d para diferentes materiales	80
1.2.A	Límites máximos permisibles para patógenos, parásitos en biosólidos.	81
1.3.A	Reducción de coliformes en una pila de composta	82
2.2.A	Entradas del modelo CSTR	85
2.3.A	Entradas del modelo (ecuaciones de transferencia)	88

Resumen

Para llevar a cabo un análisis determinista de las variables de estado (temperatura y concentración de oxígeno) durante la estabilización de biosólidos mediante el compostaje se desarrolló un modelo matemático basado en balances de materia y energía, suponiendo la mecánica del medio continuo, acoplado a un modelo cinético de Contois. El sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineales, producto de los balances, fue resuelto por: A) el método explícito de diferencias finitas (MDF) empleando el lenguaje de programación Matlab 2010.a. B) por el método de diferencias finitas acoplado al método de integración Runge-Kutta, implementando este algoritmo en el lenguaje de programación FORTRAN. Este último método mostró mayor estabilidad en la solución del modelo. Por otro lado un análisis de sensibilidad indicó que los parámetros cinéticos tienen mayor influencia en el comportamiento del modelo, por ende fueron considerados para el ajuste del modelo con el paquete estadístico GREG. Para la validación del modelo matemático se emplearon datos obtenidos de tres experimentos realizados en un reactor construido para efectuar la desinfección de biosólidos (reducción de coliformes). Este reactor fue diseñado a partir de modelos matemáticos reportados previamente y considerando un reactor continuo de tanque agitado. Las comparaciones entre el modelo desarrollado en este estudio y los datos experimentales obtenidos en el reactor, mostraron que el modelo describe los cambios en la temperatura y concentración de oxígeno durante el proceso de compostaje en forma precisa ($R^2 > 0.80$).

Palabras clave: Compostaje, desinfección, modelado matemático, transferencia de calor y masa, cinética de biodegradación

Abstract

To perform a deterministic analysis of state variables (temperature and oxygen concentration) during biosolids stabilization by composting, a mathematical model was developed. This model was based on mass and energy balances, assuming a continuum medium mechanics, coupled to a Contois growth kinetics. The system of partial differential equations were solved by A) explicit finite differences method using a Matlab 2010.a. environment and B) finite differences method coupled to Runge-Kutta integration method, this algorithm was implemented in a FORTRAN environment. The last method showed higher stability in the model solution. On the other hand a sensitivity analysis indicated that the kinetic parameters have a stronger influence on the model behavior; therefore these parameters were considered for fitting with the statistical package GREG. For validation of the mathematical model, data from three experiments performed in a biosolids sanitizing reactor (fecal coliform removal) were employed. The reactor was designed base on mathematical models previously reported, assuming a continuous stirred tank reactor (CSTR) behavior. The comparisons between the model developed in this work and experimental data obtained in the reactor showed that the model precisely described ($R^2 > 0.80$) changes in temperature and oxygen concentrations during the composting process.

Key words: Composting, sanitation, mathematical modeling, heat and mass transfer, biodegradation kinetics

1. Introducción

1.1. Problemática

El tratamiento integral que reciben las aguas residuales municipales consiste en la remoción de materia orgánica y patógenos, seguido de la remoción de los sólidos que son generados durante el tratamiento primario y secundario de dichas aguas. Estos sólidos se componen de biomasa, materia orgánica, compuestos recalcitrantes potencialmente tóxicos y altas concentraciones de parásitos y patógenos (Jiménez et al., 2000). A estos sólidos residuales se les denomina lodos.

El manejo de estos lodos sin algún tratamiento previo representa un problema ambiental y de salud pública, el cual se magnifica si dichos lodos no son dispuestos de manera adecuada en rellenos sanitarios.

El lodo que es removido del agua tratada recibe el nombre de biosólido, después de haber sido sometido a un tratamiento previo a su disposición. Una parte de este tratamiento tiene como objetivo reducir la materia orgánica putrecible (estabilización de los lodos), así como reducir los niveles de agentes patógenos causantes de enfermedades (desinfección de los lodos).

1.2. Estabilización de lodos residuales

Los métodos para llevar a cabo la estabilización de los biosólidos son: la estabilización alcalina, digestión anaerobia, digestión aerobia y el compostaje (Metcalf y Eddy, 2003).

Estabilización alcalina: Consiste en la adición de agentes químicos tales como el óxido de calcio (cal) para aumentar el pH de los lodos ($\text{pH} > 12$), provocando así la reducción de olores e incluso la inactivación de virus, bacterias y otros microorganismos (Dégremont, 1980).

Digestión anaerobia: Consiste en la biodegradación de la materia orgánica en ausencia de oxígeno molecular mediante el uso de digestores anaerobios donde

se produce biogás que posteriormente es utilizado para la obtención de energía. Este método requiere un estricto control del proceso así como un apropiado diseño y equipamiento para su aplicación (Dégremont ,1980; Metcalf y Eddy, 2003).

Digestión aerobia: Consiste en la auto-oxidación de los microorganismos, esta situación es originada cuando el suministro de sustrato disponible se agota, provocando que los microorganismos consuman su propio protoplasma para obtener la energía necesaria en el mantenimiento celular. Durante este proceso se logra oxidar del 70 al 80 por ciento de la biomasa, el resto del material se conforma por compuestos orgánicos no biodegradables (Metcalf y Eddy, 2003).

Compostaje: El compostaje se define como la biodegradación de materia orgánica y su biotransformación a productos húmicos estables. Durante este proceso la generación de calor provoca un aumento en la temperatura hasta 70 °C, estas condiciones de pasteurización favorecen la desinfección del material (Bruce et al., 1990; Brandon & Neuhauser, 1978; Kruse, 1977). El proceso de compostaje depende de factores físicos, químicos y biológicos que presentan una distribución no homogénea en la composta y por ello la población de microorganismos así como las condiciones termodinámicas varían (Richard, 1997; Ward & Brandon, 1977).

El empleo de compostaje evita la incineración de los biosólidos. La incineración es una técnica que implica un gasto energético y por consiguiente un alto costo económico (Johnke, 2003).

Las desventajas del compostaje radican en la necesidad de un área de trabajo mayor. Además, el proceso se puede ver limitado por la necesidad de un agente estructural (material abultante). No obstante, este método representa un menor gasto económico en comparación con los métodos anteriores y, al final del proceso, se obtiene un producto de valor agregado que puede ser utilizado para mejorar suelos degradados, evitando así, que el material sea confinado.

Una forma de hacer eficiente el proceso de compostaje es mediante la aplicación de reactores y modelos matemáticos que describan las variables de mayor interés. Con la aplicación conjunta de ambas herramientas, es posible tener una mejor manipulación del proceso.

1.3. Estado del arte del modelado matemático del compostaje

1.3.1. Planteamiento de modelos matemáticos

Para obtener un mejor entendimiento del proceso de compostaje, en relación a los mecanismos físico-químicos y biológicos involucrados, se han desarrollado modelos matemáticos que buscan describir los cambios de temperatura, contenido de agua y oxígeno entre otros aspectos claves en el proceso (Haug, 1993; Nakayama et al., 2007; Chad et al., 2001; Petric & Selimbasic, 2008; Moheel & White, 1998; Linelle et al., 2011; Richard, 1997).

El modelado del compostaje conlleva un alto grado de complejidad debido a que este proceso presenta heterogeneidad espacial en cuanto a sus propiedades físico-químicas y biológicas, aunado a la complejidad cinética de los cambios ocurridos al interior de la composta y las perturbaciones causadas por factores medioambientales (Zambra et al., 2011).

La mayoría de los modelos reportados en la literatura están basados en un modelo de tanque agitado, los cuales solo consideran las entradas y salidas (Chad et al., 2001; Mohee et al., 1998; Haug, 1993). No obstante se pueden encontrar modelos matemáticos que se basan en ecuaciones de transferencia de masa y energía en un sistema adiabático (Nakayama et al., 2007), así como modelos de sistemas abiertos, como las pilas de composta (Zambra et al., 2011).

Los modelos matemáticos que se han desarrollado hasta el momento, acoplan los balances de materia y energía con modelos cinéticos de biodegradación para explicar y/o predecir el comportamiento de las variables de estado involucradas en el compostaje como son la temperatura, concentración de oxígeno, dióxido de carbono, humedad, etc. (Mason, 2006).

Aunque la aplicación de modelos matemáticos ofrece la posibilidad de reducir e incluso de reemplazar los experimentos, es necesario un sistema experimental con el cual se pueda corroborar la precisión del modelo matemático.

1.3.2. Reactores y modelos cinéticos.

A continuación, se presentan tres modelos matemáticos que describen la cinética de biodegradación. Los modelos cinéticos desarrollados por Richard (1997) y Haug (2007) describen de manera conceptual una cinética de primer orden, ambos presentan similitudes en su estructura matemática y son modelos inductivos; por ende sus parámetros cinéticos son útiles para la validación de nuevos modelos matemáticos. Mientras tanto Nakayama et al (2007) proponen una cinética de Contois con un soporte teórico más rígido, sin embargo este modelo posee una estructura matemática flexible que hace efectivo su acoplamiento a otras ecuaciones.

1.3.2.1. Modelo cinético de primer orden

Richard (1997) empleó un reactor de flujo horizontal que constaba de un recipiente cilíndrico móvil en el cual se realizó el compostaje, en este sistema se monitoreó la temperatura (Figura 1.1).

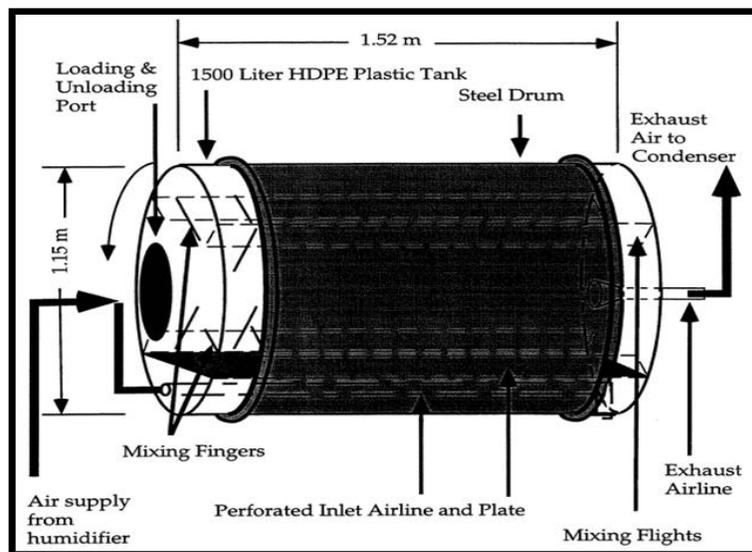


Figura 1.1. Reactor de flujo horizontal (Richard, 1997).

El análisis cinético se realizó por separado en botellas respirométricas, tomando una muestra del reactor horizontal a una temperatura determinada, la cual contendría una población microbiana correspondiente a la temperatura del reactor. En dichos recipientes se controló la humedad y la temperatura, además se monitoreó el consumo de oxígeno y la producción de dióxido de carbono.

Para describir la cinética de consumo de sustrato Richard (1997) planteó el siguiente modelo cinético plasmado en la ecuación 1.1.

$$\frac{d(BVS)}{dt} = -k_{BVS} (BVS) \quad (1.1)$$

Este modelo agrupa funciones independientes para determinar la constante cinética de primer orden (k_{BVS}), tal como se indica en la ecuación 1.2.

$$k_{BVS} = \frac{\beta_r R_{CO_2opt}}{10^3 Y_{O_2} (BVS)} f_T f_{O_2} \quad (1.2)$$

Donde:

β_r = Coeficiente de respiración endógena

R_{CO_2opt} = Evolución óptima de CO₂ a una temperatura dada (g CO₂/kg VS·día)

BVS = sólidos volátiles biodegradables=concentración de sustrato (kg SVB/kg)

Y_{O_2} = Constante de rendimiento (kg oxígeno/kg aire)

La velocidad óptima de producción de CO₂ a una temperatura dada se calcula como:

$$R_{CO_2opt} = [(R_{CO_2opt})_{max} - R_{CO_2slow}] e^{[-k(t-\tau)]} + R_{CO_2slow} \quad (1.3)$$

Donde:

R_{CO_2slow} = Evolución lenta de CO₂ (g CO₂/kg VS·d)

$(R_{CO_2opt})_{max}$ = Evolución máxima de CO₂ (g CO₂/kg VS·d)

k = Coeficiente de decaimiento de primer orden (d^{-1})

τ = Duración de la fase lag (d^{-1})

t = Tiempo (d)

Las fracciones f_T y f_{O_2} dependen de la velocidad de producción de CO_2 . Los valores de dichas fracciones se encuentran entre 0 y 1 y dependen de la temperatura y de la concentración de oxígeno.

La fracción f_T está representada por el CTIM (Cardinal temperature model with inflection) (ecuación 1.4) desarrollado por Ratkowsky et al (1983).

$$f_T = \frac{R_{CO_2}}{R_{CO_2OPT}} = \left(\frac{(T - T_{max})(T - T_{min})^2}{(T_{opt} - T_{min})(T_{opt} - T_{min})(T - T_{opt}) - (T_{opt} - T_{max})(T_{opt} + T_{min} - 2T)} \right) \quad (1.4)$$

Este modelo fue resuelto de manera numérica mediante un algoritmo llamado Complex Box-Constrained para determinar T_{min} , T_{max} y T_{opt} . Para describir la cinética en función de la concentración de O_2 (ecuación 1.6) y para el contenido de humedad se utilizó la ecuación 1.5. La Figura 1.2 muestra la interpolación múltiple a partir de la cual se obtiene la funcionalidad del parámetro $K_{O_2}(T, X_{H_2O})$.

$$K_{O_2}(T, X_{H_2O}) = 0.79 - 0.041T + 0.04X_{H_2O} \quad (1.5)$$

Donde:

X_{H_2O} = Contenido de humedad (kg H_2O /kg sólido seco)

T = Temperatura ($^{\circ}C$)

$K_{O_2}(T, X_{H_2O})$ = Constante media de saturación

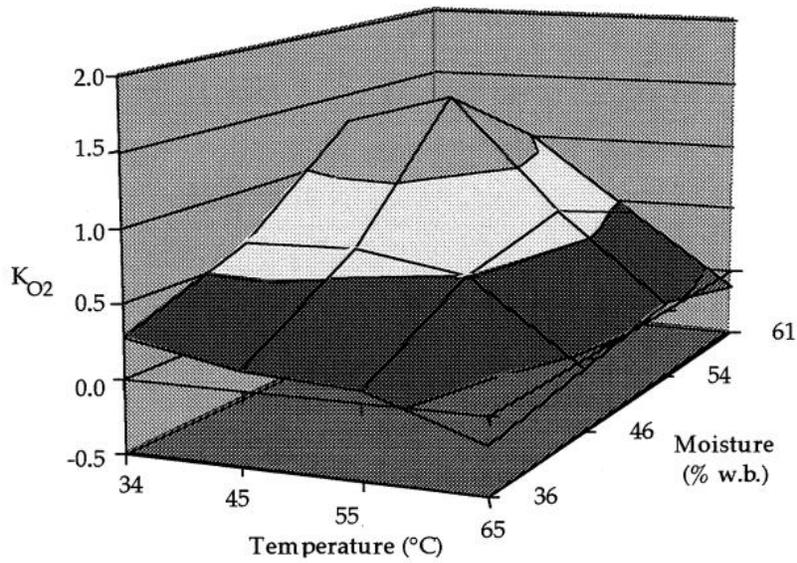


Figura 1.2. Interpolación múltiple para $k_{O_2}(\langle W \rangle^s, T)$ (Richard, 1997).

$$f_{O_2} = \frac{R_{CO_2}}{R_{CO_2}(21\%)} = \frac{O_2}{K_{O_2}(T, X_{H_2O}) + O_2} \quad (1.6)$$

Donde

$R_{CO_2}(21\%)$ =Tasa de CO_2 al 21% de O_2

O_2 = % de Oxígeno

Tanto la temperatura como el contenido de humedad resultan ser factores importantes que condicionan a la constante cinética, los valores óptimos de dichos parámetros fueron: 55% de humedad y temperatura de 65°C (Richard, 1997).

1.3.2.2. Modelo cinético de Contois

Nakayama (2007) uso un sistema semi-abierto con un flujo de aire inducido, como se muestra en la figura 1.3.

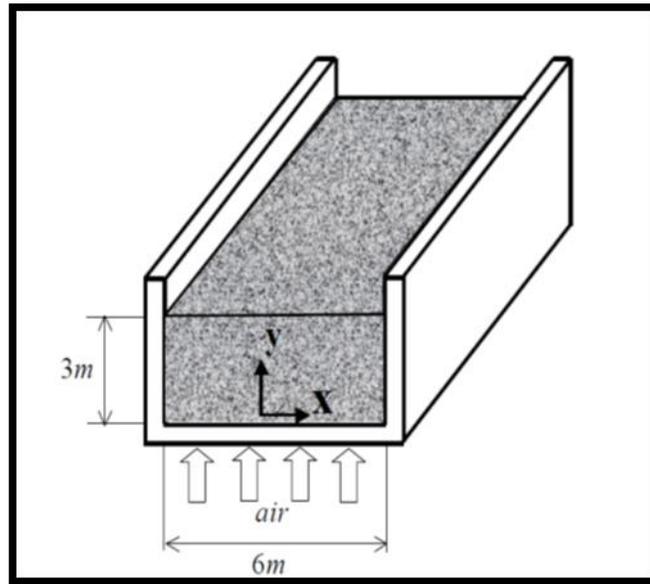


Figura 1.3. Sistema semi-abierto (Nakayama et al., 2007).

Para describir la cinética de consumo de sustrato y generación de biomasa, se empleó el modelo cinético de Contois, ecuación 1.7.

$$\frac{dC_x}{dt} = -Y \frac{dS}{dt} = \mu(W, T) \frac{C_x S}{K_c C_x + S} \quad (1.7)$$

Donde:

$\mu(W, T)$ = Constante de crecimiento específico dependiente de la humedad y la temperatura (d^{-1})

C_x = Concentración de biomasa (kg SV/kg)

Y = Rendimiento (kg SVB/kg SV)

S = Concentración de sustrato (kg SVB/kg)

$$K_c = 24$$

En este caso, la velocidad máxima de crecimiento específico $\mu(W, T)$ depende de la humedad y la temperatura. Esta dependencia se representa por una serie de expresiones matemáticas agrupadas que trabajan de manera escalonada, tal como se muestra en las ecuaciones 1.8 y 1.9.

La función que involucra a la temperatura (α) depende de tres expresiones, según sea la condición de la composta, tal como se muestra en la ecuación 1.8. Al introducir el valor de (α) en los términos correspondientes para la humedad, ecuación 1.9, se obtiene el valor final de $\mu(W, T)$. La figura 1.4 muestra el comportamiento de esta función.

$$(\alpha) \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_A}{R_A}\left(\frac{1}{T_c+273}-\frac{1}{T_m+273}\right)\right) & T_c \leq T_m \\ \frac{T_h - T_c}{T_h - T_m} & T_m \leq T_c \leq T_h \\ 0 & T_h \leq T_c \end{cases} \quad (1.8)$$

$$\left. \begin{cases} \frac{\frac{m_w - w_a}{m_s} - w_a}{K_a + \frac{m_w}{m_s}} (\alpha) & w_a \leq \frac{m_w}{m_s} \leq w_1 \\ \frac{w_1 - w_a}{K_a + w_1} \frac{w_2 - \frac{m_w}{m_s}}{w_2 - w_1} (\alpha) & w_1 \leq \frac{m_w}{m_s} \leq w_2 \\ 0 & \text{cualquier otro valor} \end{cases} \right\} \frac{\mu}{\mu_b} \quad (1.9)$$

Donde:

$$T_h = 80 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$T_m = 55 \text{ }^\circ\text{C}$$

T_c = Temperatura de la composta

$$K_a = 0.04$$

$\frac{m_w}{m_s}$ = Fracción de agua en el sólido

$$E_a = 29 \text{ (J/mol)}$$

$$R_a = 8.314 \text{ (J/mol}\cdot\text{°K)}$$

$$\mu_b = 0.18 \text{ (h}^{-1}\text{)}$$

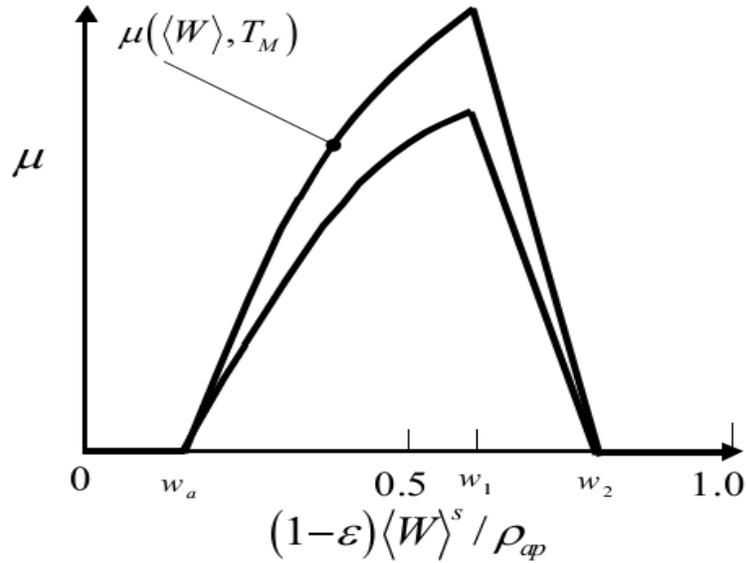


Figura 1.4. $\mu(\langle W \rangle^s, T)$ para una fracción de humedad a una cierta temperatura en el sólido (Nakayama et al., 2007).

1.3.2.3. Modelo cinético de primer orden para compuestos de lenta y rápida biodegradación

Haug (1980), considera dos fracciones en la materia orgánica, una rápidamente biodegradable y otra de lenta biodegradación, el Apéndice 1.1 muestra las fracciones correspondientes. Así, considerando una temperatura de 25 °C, los modelos cinéticos están representados con las siguientes expresiones:

$$\frac{d(BVS)_F}{dt} = k_{dF}(BVS)_F \quad (1.10)$$

$$\frac{d(BVS)_S}{dt} = k_{dS}(BVS)_S \quad (1.11)$$

La funcionalidad con la temperatura de la constante cinética (k_d), corresponde a la ecuación 1.12. Los parámetros ϕ_1 , ϕ_2 y k_{dr} se obtuvieron a partir de los datos

experimentales en respirómetros. La Figura 1.5 muestra el comportamiento de la función.

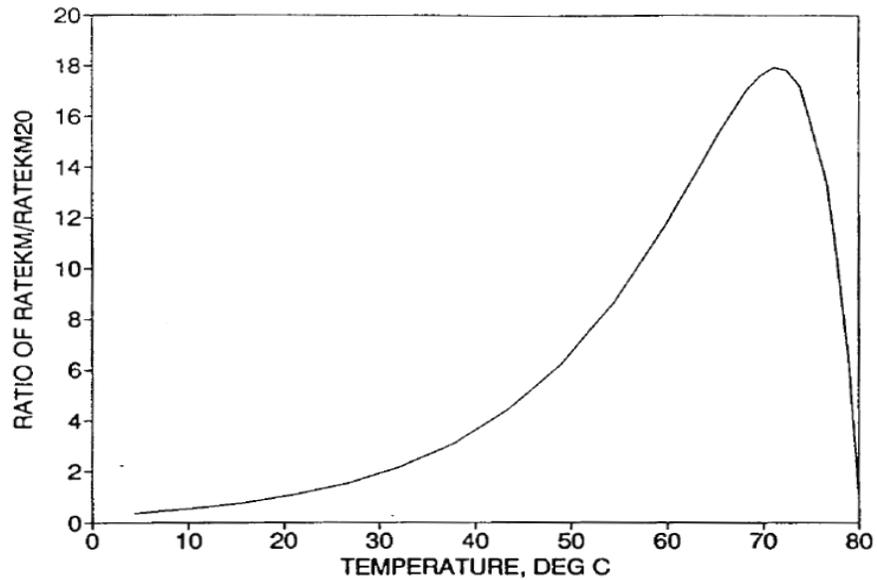


Figura 1.5. Comportamiento de k_d en función de la temperatura (Haug, 1980).

$$k_d = k_{dr} (\varphi_1^{(T-T_{R1})} - \varphi_2^{(T-T_{R2})}) \quad (1.12)$$

La constante cinética en este modelo es afectada por la concentración de oxígeno, la humedad, y los espacios libres para la permeación del aire. Haug (1980), al igual que Richard (1997), supuso funciones desacopladas, tal como se muestra en las ecuaciones 1.13, 1.14 y 1.15.

$$F1(I) = \frac{1}{e^{[-17.684*[1-SMOUT(I)]+7.0622]} + 1} \quad (1.13)$$

SMOUT (I) = Contenido de humedad en el sólido en la fase 1

$$F2(I) = \frac{1}{e^{[-23.675*FAS(I)+3.4945]} + 1} \quad (1.14)$$

FAS (I) = Fracción de espacios libres de aire en la fase 1

$$FO2(I) = \frac{VOLPO2(I)}{VOLPO2(I) + 2} \quad (1.15)$$

VOLPO 2(l) = Porcentaje de oxígeno en el gas de salida en la fase 1

$F1$, $F2$ y $FO2$ son funciones de ajuste que generan curvas logísticas que están en un rango de 0 a 1, obtenidas mediante datos experimentales; estas funciones son agrupadas en las ecuaciones 1.16 y 1.17 para determinar la constante cinética de velocidad.

$$k_{dF} = k^{\circ}_{dF} * F1 * F2 * FO2 \quad (1.16)$$

$$k_{ds} = k^{\circ}_{ds} * F1 * F2 * FO2 \quad (1.17)$$

Donde.

k°_{ds} = constante de primer orden para sustratos de lenta biodegradación a 25 °C

k°_{dF} = constante de primer orden para sustratos de rápida biodegradación a 25°C

1.4. Antecedentes

1.4.1. Generación y aprovechamiento de biosólidos

En México se estima una generación de lodos residuales mayor a 80,000 Ton/año, Pese a esta problemática, la mayoría de las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no cuentan con un sistema integral para el tratamiento de los lodos residuales (Jiménez et al., 2000). El motivo por el cual estos no son tratados de manera integral se debe, en gran medida, a que el tratamiento y disponibilidad de estos residuos implica un gasto económico elevado (Oropeza, 2006).

Después del tratamiento de los lodos, el biosólido deberá cumplir con ciertas especificaciones y podrá ser desechado o aprovechado de acuerdo a la normatividad mexicana (NOM-004-SEMARNAT-2002, Apéndice 1.2). De acuerdo a dicha norma podrá ser aplicado como fertilizante o aditamento para el mejoramiento de suelos degradados o en cultivos agrícolas forrajeros (Figeroa, 2003).

Los lodos generados en la planta de tratamiento de aguas residuales PTAR del parque Tangamanga I, localizada en la ciudad de San Luis Potosí, alcanzan la clasificación tipo C debido al contenido de patógenos.

1.4.2. Trabajos previos de compostaje de biosólidos en la PTAR Tangamanga I

Gómez Tovar (2007) utilizó un sistema de compostaje abierto y estático para diferentes microcosmos como se observa en la Figura 1.6, donde se monitoreó la temperatura y se determinó la relación C/N.

En dichos experimentos se observó que la cantidad mínima de material para generar un autocalentamiento es de 500 kg. Así mismo, se determinó que la mezcla óptima de material para llevar a cabo el compostaje de biosólidos es de 10% de pasto, 40% de material leñoso y 50% de biosólidos (% en peso).



Figura 1.6. Microcosmos en invernadero (Gómez Tovar, 2007).

Con esta mezcla Gómez Tovar (2007) obtuvo una relación C/N de 38:1 muy cercana al óptimo de 40:1. Durante la fase termofílica de este experimento se alcanzaron temperaturas de 60°C y durante la fase de maduración, se observó una disminución en el NMP de coliformes fecales, tal como se muestra en la Figura 1.7.

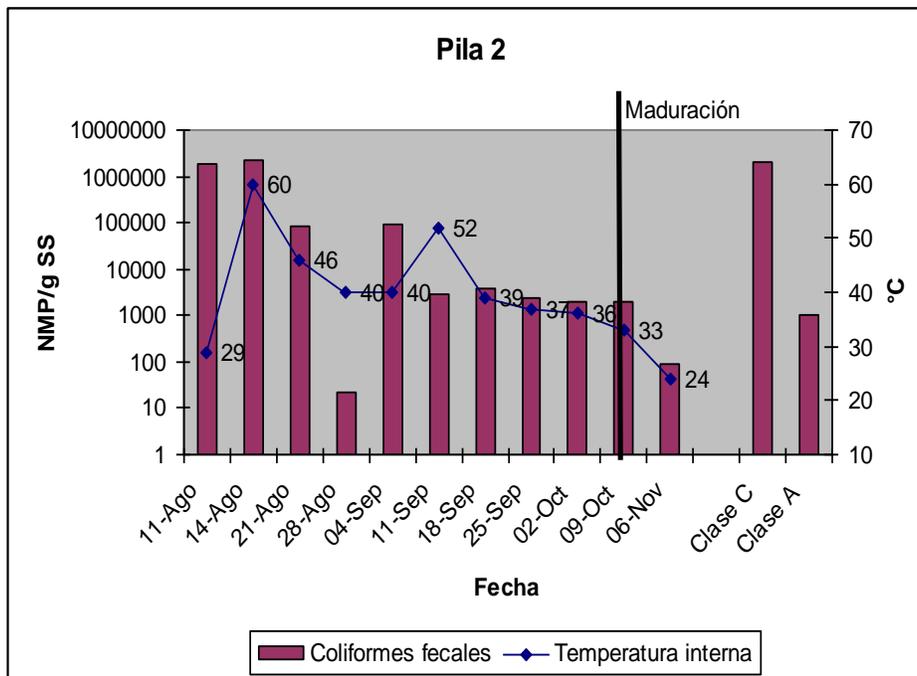


Figura 1.7. Disminución de coliformes fecales durante el proceso de compostaje para la estabilización de biosólidos (Gómez Tovar, 2007).

Posteriormente, el experimento fue escalado por Alatraste et al (2011) quienes utilizaron un sistema de compostaje abierto con aireación forzada, mostrado en la Figura 1.8. En dicho experimento se montaron cuatro pilas de diferente composición tal como se muestra en la tabla 1.1. A cada una de las pilas se le determinó humedad, coliformes, concentración de oxígeno, temperatura, remoción de patógenos y contenido de metales pesados.

Tabla 1.1. Composición de las pilas de composta (Alatraste et al., 2011)

MATERIAL	PILAS 1 y 2	PILA 3	PILA 4
	% en peso		
Biosólidos	32	40	50
Residuo poda ^a	32	28.4	23.4
Hojas	32	28.4	23.4
Pasto	4	3.2	3.2
Peso total de la pila (ton)	2	2.3	2.6

^a El residuo de poda estaba compuesto por ramas y tallos triturados

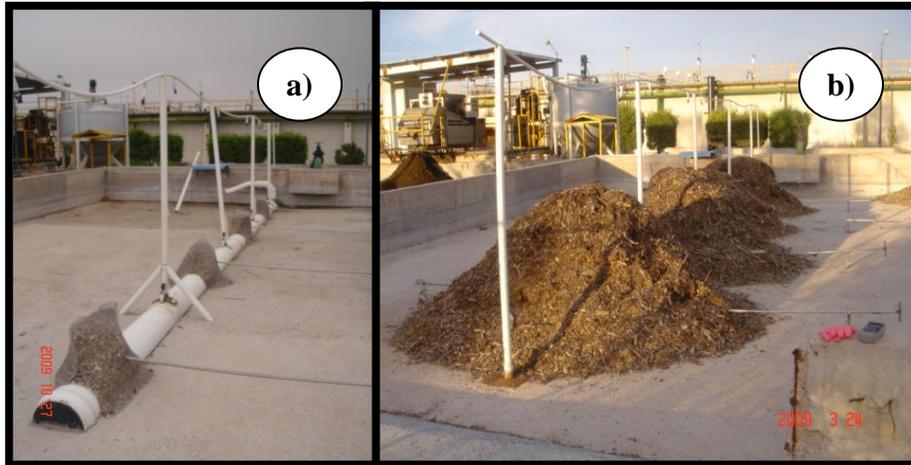


Figura 1.8. Sistema de compostaje abierto: a) Sistema de aireación y b) pilas de composta de una tonelada (Alatríste et al., 2011).

El flujo de aire se suministró de manera uniforme mediante un compresor en ciclos de encendido/apagado. La velocidad de flujo de aire del sistema, mostrado en la figura 1.9, varía según la porosidad del medio, la cual es afectada por el contenido de agua, la disgregación y compactación del material a lo largo del proceso (Van Ginkel., et al 1999).

Pese a la diferente composición de cada pila, se observó un aumento de temperatura mayor a 50 °C que se mantuvo por más de 20 días (Figura 1.10), esta condición favoreció la reducción de coliformes e incluso fue posible observar un recrecimiento casi nulo de coliformes después de siete meses de maduración, Apéndice 1.3.

El hecho de haber logrado mantener las temperaturas elevadas por varios días se debió, a la cantidad de material biodegradable disponible para los microorganismos, así como a la relación volumen/área de transferencia que permitió un aislamiento efectivo de la pila.

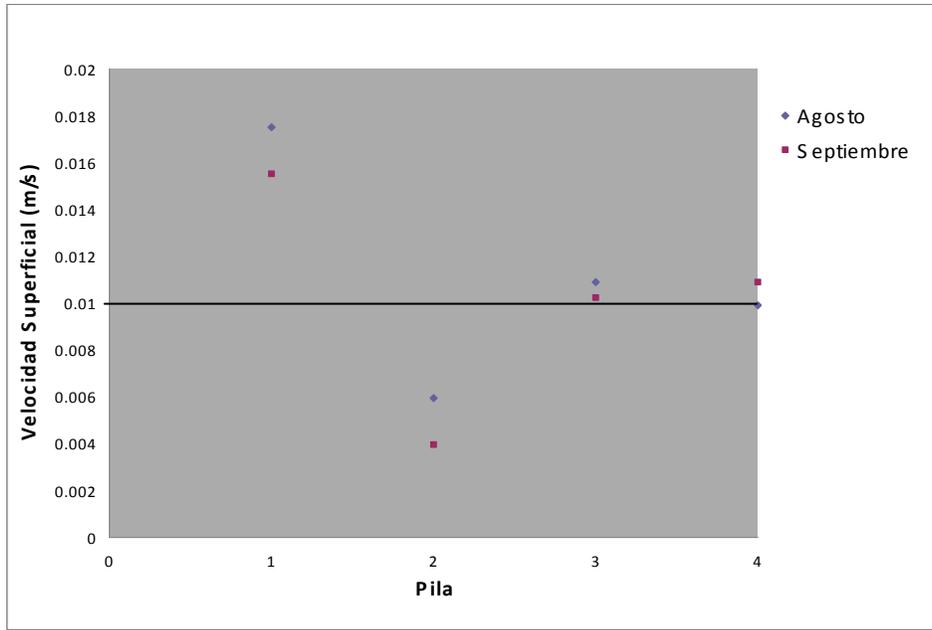


Figura 1.9. Velocidad de flujo medidas en las cuatro pilas de composta (Alatraste et al., 2011).

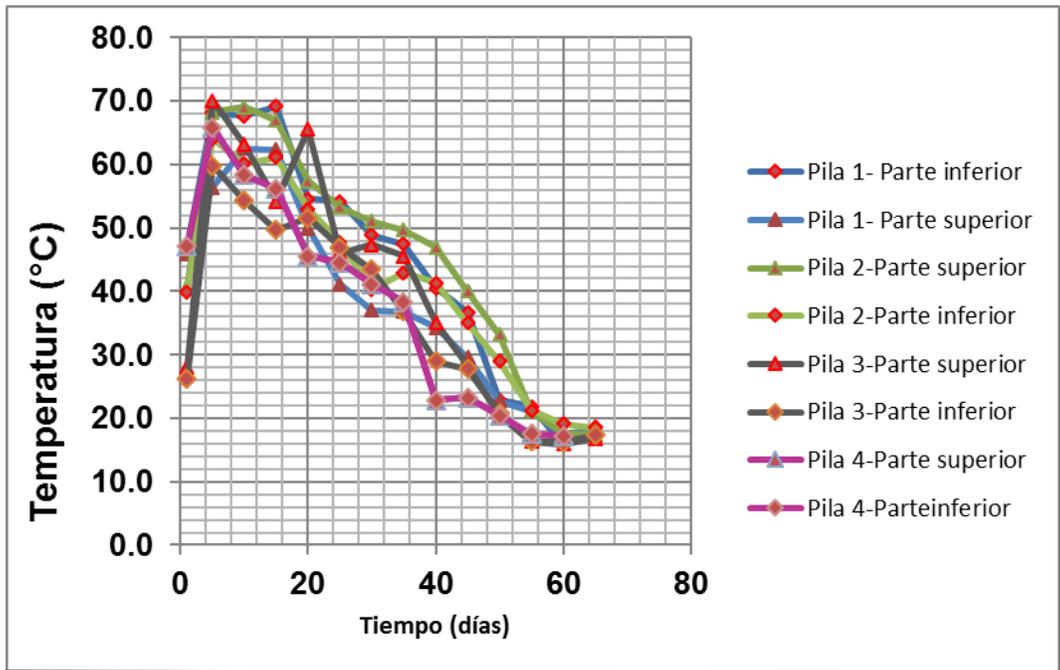


Figura 1.10. Temperatura observada en los puntos centrales referentes a la parte inferior y superior de las cuatro pilas (Alatraste et al., 2011).

1.5. Justificación

El proceso de compostaje, tanto en sistemas abiertos como cerrados, presenta ciertas dificultades de operación. Para el caso de los sistemas abiertos, los factores medioambientales como la temperatura y la humedad no son manipulables y tienen gran influencia sobre el desempeño del proceso.

El material sometido a compostaje no es homogéneo en cuanto a sus propiedades físicas, químicas y biológicas; con ello resulta complicado analizar y manipular el proceso de compostaje.

Debido a lo anterior, en el presente trabajo se propone el empleo de un reactor tubular a escala piloto térmicamente aislado, para reducir el efecto de los factores medioambientales donde se puedan manipular las variables de operación más importantes como lo son la humedad, temperatura y el flujo de aire.

La aplicación de modelos matemáticos permitirá entender y describir el comportamiento del proceso, una mayor manipulación de las variables de operación y en trabajos futuros permitirá la implementación de un control en el sistema.

1.6. Hipótesis

El desarrollo de un modelo matemático, basado en la mecánica del medio continuo, logrará describir el comportamiento dinámico de temperatura y concentración de oxígeno en el lecho de composta.

Con la implementación de un modelo de tanque agitado considerando un sistema adiabático, se podrá diseñar un reactor aislado térmicamente donde se alcanzara la temperatura de pasteurización ($T > 40^{\circ}\text{C}$) en todo el lecho, lo cual disminuirá el recrecimiento de coliformes fecales.

1.7. Objetivos

1.7.1. Objetivos generales

Llevar a cabo un análisis determinista del proceso de compostaje para la estabilización de biosólidos empleando un modelo matemático construido a partir de balances para la transferencia de materia y energía, acoplados a una cinética de biodegradación. Con este modelo se pretende describir el comportamiento de las variables de estado (temperatura de la composta y concentración de oxígeno).

Corroborar las aproximaciones del modelo con datos experimentales obtenidos de un sistema funcional previamente diseñado para la estabilización de biosólidos, en donde se puedan analizar la temperatura y la concentración de oxígeno.

1.7.2. Objetivos específicos

- Emplear un modelo matemático que describa el proceso de compostaje y desarrollar un programa en Matlab que permita resolverlo de manera numérica utilizando parámetros de la literatura.
- En base a las simulaciones arrojadas por la solución numérica del modelo matemático, construir un reactor tubular de flujo vertical a escala piloto térmicamente aislado, donde se puedan obtener datos experimentales continuos que permitan el desarrollo de un modelo matemático.
- Desarrollar un modelo matemático, basado en la mecánica del medio continuo, mediante balances de materia y energía acoplado con la cinética de Contois, que permita describir los cambios espaciales y temporales de temperatura y concentración de oxígeno.
- Validar el modelo mediante diferentes corridas experimentales variando el tamaño del reactor y la velocidad del flujo de aire a la entrada.

2. Metodología

2.1. Algoritmo de la metodología

El algoritmo de la figura 2.1 presenta de forma estructurada el orden en que se realizaron las actividades en este trabajo. Los cuadros en rojo, representan la etapa de diseño y construcción, así mismo, los cuadros en azul corresponden a la etapa del desarrollo del modelo matemático.

Se inició con la idea de conceptualización del proceso de compostaje y revisión del estado del arte de los modelos matemáticos para, posteriormente, implementar estos modelos en la computadora. Esta etapa permitió establecer los parámetros fundamentales del diseño del reactor para alcanzar la temperatura deseada.

Posteriormente se construyó el reactor y los datos obtenidos se retroalimentaron al modelo de diseño para alcanzar las temperaturas deseadas de pasteurización.

Una vez que se tuvo un sistema funcional, donde la temperatura interna del reactor se mantuvo por encima de 50 °C durante de 5 días, se inició la segunda parte del trabajo que consistió en el desarrollo de un modelo matemático. La idea fundamental es que dentro del reactor el comportamiento no es homogéneo y, en contraste, existen gradientes de temperatura y concentración de oxígeno.

Una vez desarrollado el modelo se implementó en la computadora y se ajustaron sus parámetros mediante GREG, que es un programa desarrollado en FORTRAN. Este programa, compara los datos experimentales con los datos obtenidos del modelo y, mediante regresiones multiparamétricas no lineales, obtiene los parámetros que permiten al modelo matemático describir el comportamiento del fenómeno.

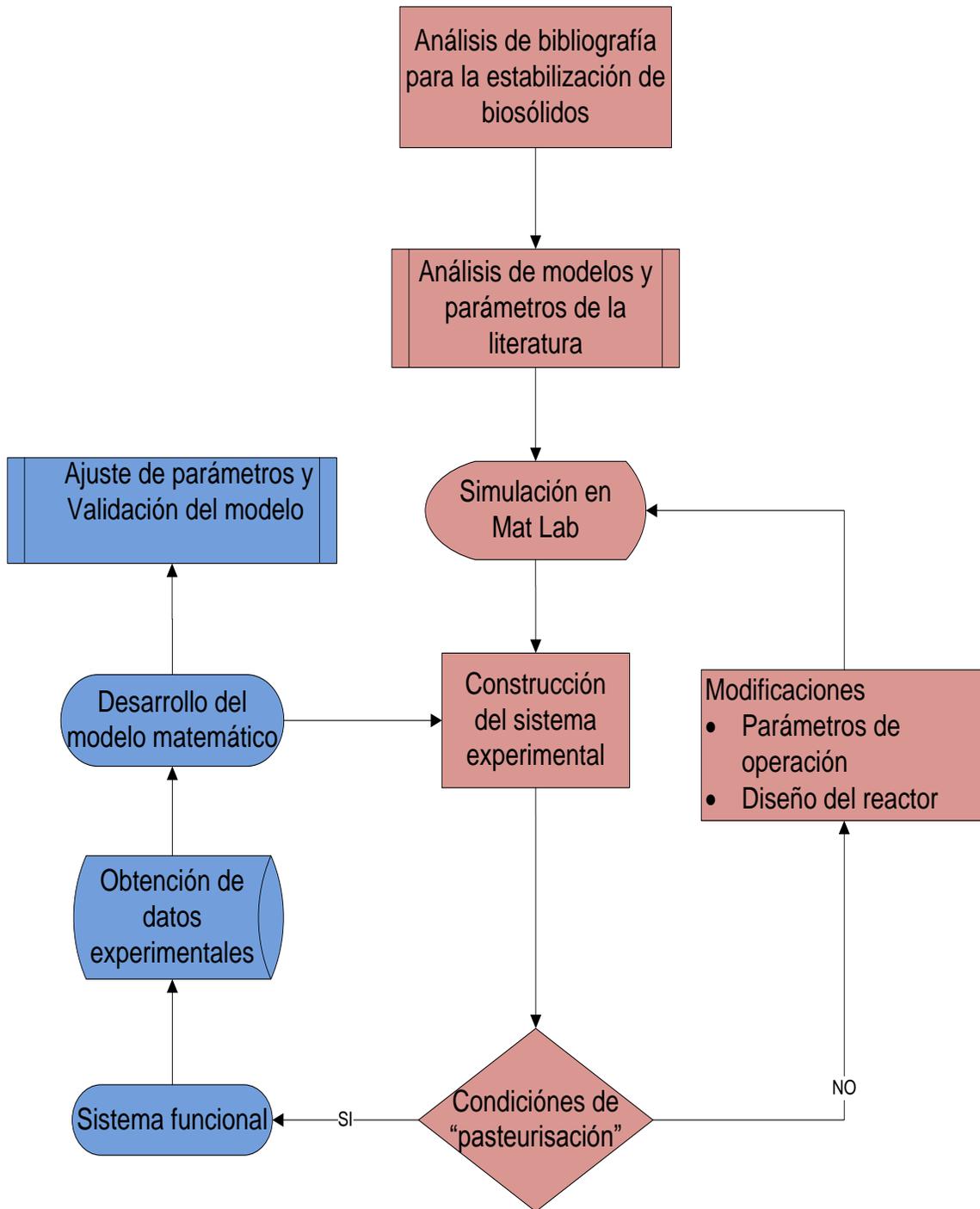


Figura 2.1. Diagrama de flujo de la metodología seguida.

2.2. Criterios de diseño del sistema experimental

2.2.1. Análisis de la dispersión en un reactor tubular

Para facilitar el análisis de la dispersión de la fase gaseosa en el interior del reactor tubular es deseable minimizar los efectos de dispersiones transversales en comparación con los efectos axiales. Esto se logra conforme la relación L/D es mayor, tal como lo demuestran los análisis de dispersión reportados por Delgado (2006). Para lograr esto se maximizó la relación L/D considerando que la longitud del lecho no debe ser mayor a 3 m, debido a los efectos de compactación en la composta (Van Ginkel et al., 1999; Ahn et al., 2007). Siguiendo estos criterios se encontró un valor máximo para L/D igual a 8.

Por otra parte, para llevar a cabo el diseño y construcción de un reactor tubular de lecho empacado se consideró, como una primera aproximación, modelarlo como un CSTR con base en la gráfica de la Figura 2.2; cuya obtención se describe en el Apéndice 2.1. Dicha gráfica muestra el comportamiento de un reactor tubular en función del número adimensional Peclet ($Pe=vd_p/D$), si $Pe>100$ el reactor se comporta como un reactor tubular de flujo pistón (PFR), si $Pe< 0.1$ el reactor se comporta como un reactor continuo de tanque agitado (CSTR).

Los parámetros de diseño del reactor se muestran en la Tabla 2.1. Los valores de Pe con los que se operó el reactor fueron menores a 0.1. Por lo tanto, modelar el reactor como un CSTR fue una aproximación que permitió su construcción. Posteriormente se corroboró la validez de esta suposición comparando los datos experimentales con este modelo.

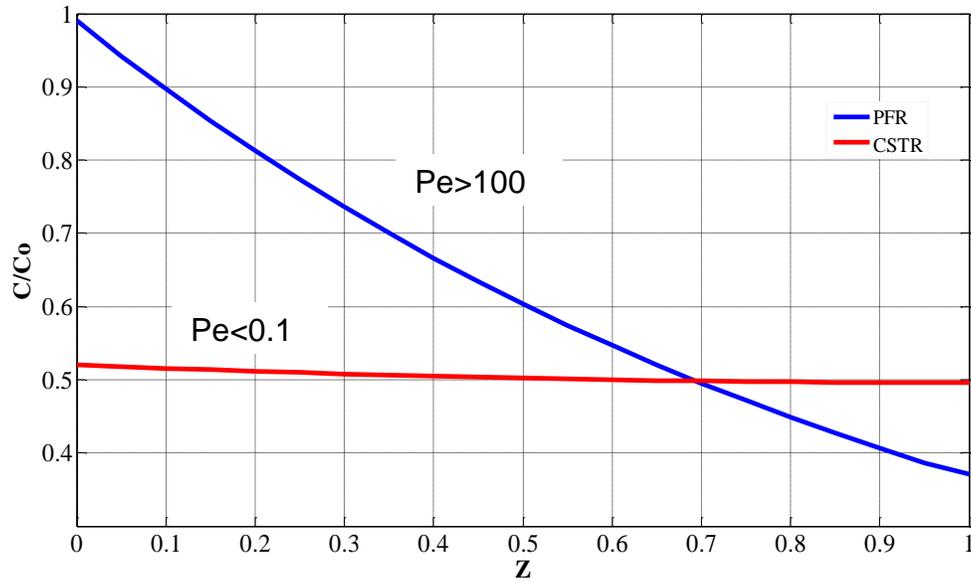


Figura 2.2. Solución analítica del modelo de dispersión en z en estado estacionario. C/C_0 = Concentración normalizada, Z = Coordenada adimensional en el espacio para la longitud de una columna empacada.

Tabla 2.1. Parámetros de diseño del reactor

Parámetro	Valor (Rango)	Unidades
Velocidad superficial	$4.91 \times 10^{-5} - 4.41 \times 10^{-4}$	m/s
Diámetro de la partícula promedio	0.02	m
Longitud	1.6	m
Dispersión	$1.49 \times 10^{-5} - 1.90 \times 10^{-5}$	m/s
Pe	$6.62 \times 10^{-2} - 4.70 \times 10^{-1}$	

2.2.2. Ecuaciones de diseño

2.2.2.1. Balance de masa para el agua

El balance de masa para el agua en la composta representado por la ecuación 2.1 considera: la entrada de agua en el aire saturado a la temperatura ambiente $G_1 H_s(T_{amb})$, la salida de agua en el aire saturado a la temperatura del sistema $G_2 H_s(T)$ y la generación de agua por la acción microbiológica.

$$m_s \frac{dW}{dt} = G_1 H_s(T_{amb}) - G_2 H_s(T) - Y_{H_2O} \left(-\frac{dS}{dt} \right) \quad (2.1)$$

2.2.2.2. Balance de masa para el oxígeno

El balance de masa para el oxígeno considera que los flujos de aire a la entrada y a la salida del reactor contienen una fracción de oxígeno $G_1 X_{O_2}$ y $G_2 X_{O_2}$ respectivamente. Así también, en el último término de la ecuación 2.2, el balance considera la utilización de O_2 por parte de los microorganismos.

$$m_{O_2} \frac{dC_{O_2}}{dt} = G_1 X_{O_2} - G_2 X_{O_2} + Y_{O_2} \left(-\frac{dS}{dt} \right) \quad (2.2)$$

2.2.2.3. Balance de energía

El balance de calor mostrado en la ecuación 2.3 considera: la energía que se aporta y se pierde, por el flujo de aire saturado, en forma de calor latente. Así también, se considera la energía generada por la reacción y la transferencia de calor a través de las paredes del reactor.

$$m_c C_p \frac{dT}{dt} = h_v G_1 H_s(T_H) - h_v G_2 H_s(T) + H_{rx} \left(-\frac{dS}{dt} \right) - k(\Delta T) \quad (2.3)$$

Para el diseño del reactor, los balances descritos en la sección 2.2.2 fueron acoplados con cada modelo cinético descrito en la sección 1.3.2. Los parámetros de las ecuaciones de diseño se muestran en el Apéndice 2.2.

Las simulaciones de los modelos anteriores se realizaron en MatLab utilizando la subrutina ode45, la cual es una variante del método de integración de Runge-Kutta con aproximaciones de cuarto orden.

2.3. Análisis e implementación del sistema experimental

2.3.1. Construcción del reactor

Columna del reactor. Para construir el reactor se utilizó tubería de PVC cédula 40 de 4 mm de espesor de alta densidad con una longitud de 2.7 m. por 10" de diámetro ($L/D= 8.5$). Se realizaron 5 perforaciones de 1 ½" para utilizarlas como puertos de muestreo y dos perforaciones de 8" de diámetro, cada una situada en los extremos, para introducir y extraer material.

Mezcla de material. La mezcla de material se constituyó de 10 % (en peso) de pasto fresco, 40 % de material leñoso (tronquillo, hojarasca y ramas) y 50 % de lodos disponibles en el parque Tangamanga I; dicha mezcla es apropiada para obtener una relación de C/N cercana al óptimo (40:1).

El material leñoso se cribó con una malla de 5 mm y se mezcló hasta homogenizar. Se colocó dentro del reactor una cama de grava previamente cribada ($5\text{mm} < dp < 10\text{ mm}$). El espesor del lecho fue de 10 cm.

Aislamiento térmico. El aislamiento térmico consistió en una capa de aluminio al interior del reactor y otra en la parte externa del mismo, seguida de una capa de barniz, otra de espuma de poliuretano de ½" de espesor y una capa más de 1 ½" de fibra de vidrio forrada con hule y recubierta de aluminio.

Alimentación de aire. El aire a la entrada fue suministrado por dos bombas (Elite 801) conectadas a un humidificador con dos calentadores eléctricos manipulados

con un controlador para calentar y mantener constante la temperatura y la humedad del aire a la entrada del reactor.

Aditamentos. Cuenta con una salida para la recolección de lixiviados, un compresor para restablecer flujos taponados, un extractor para remover vapores y redistribuir el agua. El esquema del sistema experimental se muestra en la Figura 2.7.

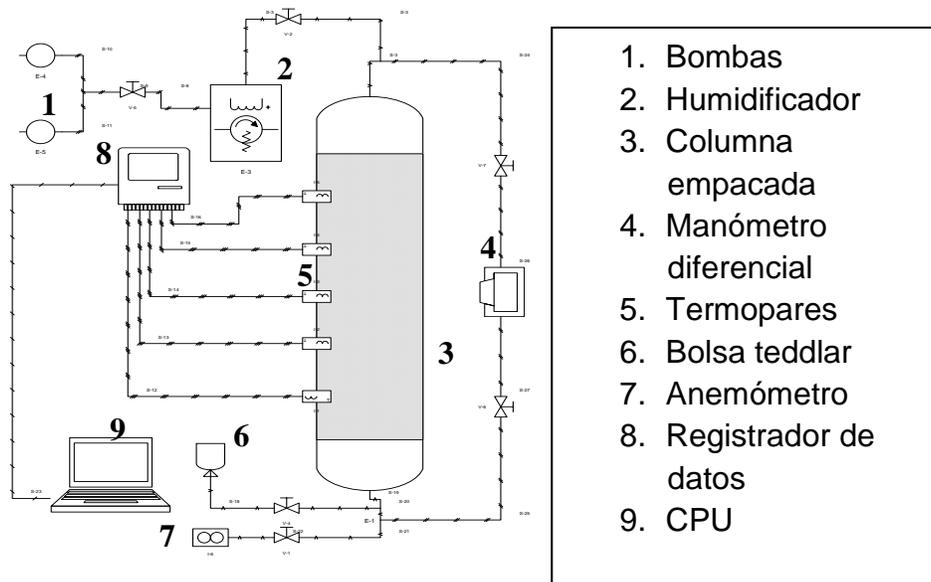


Figura 2.3. Esquema del sistema experimental

Medición de oxígeno. El aire fue colectado en bolsas teddlar de 500 ml para después analizar el contenido de oxígeno y dióxido de carbono en un cromatógrafo (Agilent 6890) equipado con un detector TCD, estas mediciones se realizaron cada 6 horas.

Humedad. Se colectaron muestras de 500 g en la salida del reactor a las cuales se les tomó 6 alícuotas al azar de 5 g que fueron deshidratadas individualmente en un analizador de humedad (Thermo Analyzer Mb45) programado de manera escalonada de la siguiente forma: 50 °C durante 15 min para eliminar el agua en la superficie y posteriormente a 130 °C durante 15 min, para deshidratar la alícuota.

Caídas de presión. Se colocaron válvulas a la entrada y a la salida del reactor conectadas a un manómetro diferencial para medir la caída de presión.

2.3.2. Obtención de los parámetros de diseño

Temperatura. Se utilizaron 15 termopares tipo J situados a lo largo del reactor, estos se distribuyeron cada 75 cm longitudinalmente y cada 3 cm radialmente, así se obtuvieron los datos de la temperatura en dos dimensiones, longitudinal y radial. Los termopares se conectaron a un almacenador de datos (Delta T Devices Modelo:DL2-e).

Flujo de aire. El flujo de aire a la entrada del reactor se suministró mediante dos bombas de flujo variable con capacidad de 1500 cc/seg. El aire llega al reactor saturado a una temperatura dada T_0 , después de pasar por un humidificador que se manipuló mediante un control de lazo cerrado. Por otra parte el flujo de aire a la salida se monitoreó diariamente con un anemómetro.

Determinación de U (Coeficiente global de transferencia de calor). Para encontrar el coeficiente global de transferencia de calor, asociado a las pérdidas de calor por conducción y convección, se calentó agua hasta 70 °C dentro del reactor, se midió el cambio de la temperatura del agua a lo largo del tiempo.

Los datos obtenidos se utilizaron para determinar, mediante la ecuación de transferencia de calor, k_T , el coeficiente global de transferencia de calor U indicado en la ecuación 2.4. Resolviendo la ecuación diferencial anterior da como resultado la ecuación 2.5.

$$\frac{dT}{dt} = -k_T(\Delta T) \therefore k_T = \frac{UA}{C_p V_r \rho} \quad (2.4)$$

$$\ln\left(\frac{T - T_a}{T_1 - T_a}\right) = -k_T(t - t_1) \quad (2.5)$$

Determinación del calor generado por la reacción. Para obtener el calor de la reacción se determinó la fórmula molecular de la mezcla de materiales, basada en su contenido de carbono (C), nitrógeno (N), oxígeno (O) e hidrógeno (H).

Para poder determinar el C, N y H la muestra se secó, en una estufa Precision Econotherm, a 60 °C por cuatro horas, posteriormente se deshidrató y trituró en un molino de bolas, Retsch mm 266, a 2 rpm por 2 minutos, la muestra triturada fue analizada en un Analizador Elemental COSTECH (ECS4010).

Para determinar la cantidad de O fue necesario analizar el contenido de cenizas (material inorgánico). Considerando que la muestra solo contiene C, H, O y N la cantidad de oxígeno debe ser igual al contenido de C, H y N menos la cantidad de material inorgánico.

Una vez determinada la fórmula molecular de la composta ($C_aH_bO_cN_d$), se emplea el número de átomos de C y H en la ecuación 2.6 (Spoehr & Milner, 1949).

$$R = 100 * \frac{2.66(C) + 7.94(H) - (O)}{398.9} \quad (2.6)$$

Donde R es el grado de reducción orgánica y es empleado en la siguiente expresión para determinar el calor de reacción (H_{rx}).

$$H_{rx} = 127 \cdot R + 400 \quad (2.7)$$

2.4. Desarrollo de un modelo matemático del proceso de compostaje basado en los mecanismos de transporte de calor y masa en estado no estacionario

2.4.1. Descripción del modelo

Este modelo matemático (MTT, Modelo de Transporte en estado Transitorio), se desarrolló basándose en la hipótesis del medio continuo, la cual considera que el movimiento de un flujo, de masa o energía es continuo a lo largo de un elemento en el espacio, sin tomar en cuenta la estructura molecular del medio y las discontinuidades asociadas a ello.

Los balances de materia y energía se realizaron sobre un elemento diferencial cuyo dominio en el espacio está representado por las coordenadas cilíndricas r y z , (Figura 2.4).

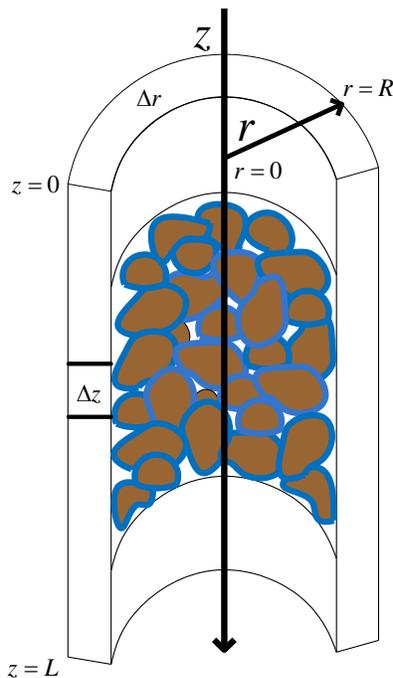


Figura 2.4. Elemento diferencial

El elemento diferencial representa una matriz porosa formada por: una fracción volumétrica de agua (f_w), material sólido conformado por pasto (f_G), material lignocelulósico (tronquillo y hojarasca) (f_L), el sólido seco contenido en los biosólidos (f_{DS}) y por una fracción volumétrica de aire (f_g) referente a la fase gaseosa.

La transferencia de masa o energía a través del elemento diferencial considera, de manera general, el siguiente balance en términos de flux máxicos J y flux de calor q , a la entrada y a la salida, ecuación 2.8.

$$V \cdot A|_t = (A_1 \cdot E|_r + A_2 E|_z) - (A_3 S|_{r+\Delta r} + A_2 S|_{z+\Delta z}) \pm \Psi + \Omega$$

$$V = 2\pi r \Delta z \Delta z \tag{2.8}$$

$$A_1 = 2\pi r \Delta z$$

$$A_2 = 2\pi r \Delta r$$

$$A_3 = 2\pi(r + \Delta r) \Delta z$$

Donde:

V = Volumen de acumulación

A = Área de transferencia

E = Entrada

S = Salida

Ψ = Generación o consumo

Ω = Transferencia entre las fases

2.4.2. Consideraciones

- El reactor se llenó con una mezcla homogénea de material para el compostaje.
- Las propiedades físicas como densidad, capacidad calorífica, conductividad y porosidad permanecen constantes.
- La fase líquida está en equilibrio termodinámico con la fase sólida
- El calor y la humedad suministrados, por aire saturado a la entrada del reactor, se consideraron equivalentes al calor y la humedad del aire saturado a la salida del reactor. De esta manera se considera que la humedad del lecho permanece constante.
- Solo se consideran los cambios axiales y radiales de temperatura.
- Solo se consideran los cambios axiales de oxígeno.

2.4.3. Balances de materia y energía sobre un elemento diferencial

2.4.3.1. Balance de masa para el oxígeno

En la distribución de oxígeno a través del lecho (ecuación 2.9), se considera: la transferencia de masa por dispersión y convección en z , caracterizadas por D_{effz} y v_z . También se considera el oxígeno utilizado por los microorganismos mediante $Y_{O_2}\gamma_x$.

$$f_g \frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = -v_z \frac{\partial C_{O_2}}{\partial z} + D_{effz} \frac{\partial^2 C_{O_2}}{\partial z^2} + Y_{O_2}\gamma_x \quad (2.9)$$

El coeficiente de dispersión D_{effz} fue calculado mediante una correlación empírica (ecuación 2.10), donde la tortuosidad $\tau \rightarrow \sqrt{2}$ cuando $v_i \rightarrow 0$.

$$D_{effz} = \frac{D_m}{\tau} + 0.5 \cdot D_m \cdot Pe^{1.2} \quad (2.10)$$

La ecuación 2.11 está sujeta a las siguientes condiciones de frontera y de valor inicial:

$$\begin{aligned} t=0 \quad C_{O_2} &= C_{O_2}^\circ \\ z=0 \quad C_{O_2} &= C_{O_2}^\circ \\ z=L \quad \frac{\partial C_{O_2}}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.4.3.2. Balance de energía para la fase compuesta (sólido-líquido)

Para describir el transporte de calor en la fase sólido-líquido se consideraron los siguientes mecanismos de transporte: a) la transferencia de calor por conducción en r y z representada por la ley de Fourier donde k_{eff} (ecuación 2.14) es el coeficiente de conductividad efectiva que engloba todos los componentes de la fase sólido-líquido, b) el calor que se transfiere entre la fase compuesta y la fase gaseosa indicado por $H(T_a - T_s)$ y c) $H_{rx}\gamma_s$ indica el calor generado por la reacción, de esta forma que el balance queda representado por la ecuación 2.12:

$$\langle \rho C_p \rangle^s \frac{\partial T_s}{\partial t} = k_{eff} \left[\frac{1}{r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right] + H_{rx}\gamma_s + H(T_a - T_s) \quad (2.12)$$

Los coeficientes de conductividad efectiva en r y en z no son equivalentes, sin embargo, se encuentran dentro del mismo orden de magnitud y con ello el modelo se simplifica al considerar que $k_{effz} \approx k_{effr}$.

$$\langle \rho C_p \rangle^c = f_{DS}\rho_{DS}C_{pDS} + f_L\rho_L C_{pL} + f_G\rho_G C_{pG} + f_w\rho_w C_{pw} \quad (2.13)$$

$$k_{eff} = f_{DS}k_{DS} + f_L k_L + f_G k_G + f_w k_w \quad (2.14)$$

El coeficiente de transferencia entre las dos fases se determinó mediante la siguiente expresión:

$$H = \frac{Nu \cdot \lambda_{effs}}{d} \quad (2.15)$$

El balance de calor para la fase compuesta se sujetó a las siguientes condiciones de frontera y de valor inicial (ecuación 2.16):

$$\begin{aligned}
t = 0 \quad T &= T_{amb} \\
T_s|_{z=0} &= T_0 \\
-k_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial z} \Big|_{z=L} &= h(T_{amb} - T_s|_L) \\
\frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=0} &= 0 \\
-k_{eff} \frac{\partial T_s}{\partial r} \Big|_{r=L/16} &= U(T_{amb} - T_s|_R)
\end{aligned} \tag{2.16}$$

2.4.3.3. Balance de energía para la fase gaseosa

Para la fase gaseosa se consideró que los principales mecanismos de transferencia están dados por: a) convección en z debido al flujo de aire a una cierta velocidad (v_z), b) conducción en r y z donde ($\lambda_{effr} \neq \lambda_{effz}$) debido a que la fase es móvil y c) La transferencia de calor entre las fases indicada por $H(T_s - T_a)$, este último término del balance une las ecuaciones 2.12 y 2.17 por su dependencia de la temperatura en la fase compuesta (T_s) y la temperatura en el aire (T_a). De esta manera el balance queda representado por la ecuación 2.17:

$$f_g \rho_a C p_a \frac{\partial T_a}{\partial t} = -\rho_a C p_a v_z \frac{\partial T_a}{\partial z} + \lambda_{effz} \frac{\partial^2 T_a}{\partial z^2} + \lambda_{effr} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_a}{\partial r} \right) + H(T_s - T_a) \tag{2.17}$$

Los coeficientes λ_{effz} y λ_{effr} son determinados mediante las siguientes correlaciones:

$$\lambda_{effz} = f_a \lambda_a + \frac{1}{2} [\text{Pr} \cdot \text{Re}_p] \lambda_a \tag{2.18}$$

$$\lambda_{effr} = f_a \lambda_a + \frac{1}{10} [\text{Pr} \cdot \text{Re}_p] \lambda_a \quad (2.19)$$

Las condiciones de frontera y de valor inicial que rigen el sistema gaseoso son las siguientes:

$$\begin{aligned} t = 0 \quad T &= T_{amb} \\ T_a \Big|_{z=0} &= T_0 \\ -\lambda_{effz} \frac{\partial T_a}{\partial z} \Big|_{z=L} &= h(T_{amb} - T_a \Big|_L) \\ \frac{\partial T_a}{\partial r} \Big|_{r=0} &= 0 \\ v_z \rho_a C p_a - \lambda_{effr} \frac{\partial T_a}{\partial r} \Big|_{r=L/16} &= U(T_{amb} - T_a \Big|_R) \end{aligned} \quad (2.20)$$

2.4.4. Modelo cinético

En este trabajo se utilizó el modelo cinético de Contois, introduciendo las dos siguientes modificaciones: se le hizo dependiente de la concentración de oxígeno a través de f_{O_2} e introduciendo un término correspondiente al decaimiento celular ($b \cdot X$):

$$\frac{\partial X}{\partial t} = -Y \frac{\partial S}{\partial t} = \mu(T_s) \frac{S \cdot X}{K_c \cdot X + S} \cdot \frac{C_{O_2}}{K_{O_2} + C_{O_2}} - b \cdot X = \gamma_s \quad (2.21)$$

La influencia de la temperatura de la fase compuesta T_s se encuentra en los términos $\mu(T_s) = (\mu)(\alpha_1)$ y $b = (\mu_b)(\alpha_2)$ descritos por las ecuaciones 2.22 y 2.23, respectivamente, donde:

$$(\alpha_1) \begin{cases} \exp\left(\frac{E_A}{R_A}\left(\frac{1}{T_s+273}-\frac{1}{T_m+273}\right)\right) & T_s \leq T_m \\ \frac{T_h - T_s}{T_h - T_m} & T_m \leq T_s \leq T_h \\ 0 & T_h \leq T_s \end{cases}$$

(Ec. 2.22)

$$(\alpha_2) \begin{cases} \exp\left(\frac{E_{A2}}{R_A}\left(\frac{1}{T_s+273}-\frac{1}{T_m+273}\right)\right) & T_s \leq T_m \end{cases}$$

(Ec. 2.23)

En la Figura 2.5 se muestran los comportamientos de α_1 , α_2 y f_{O_2} .

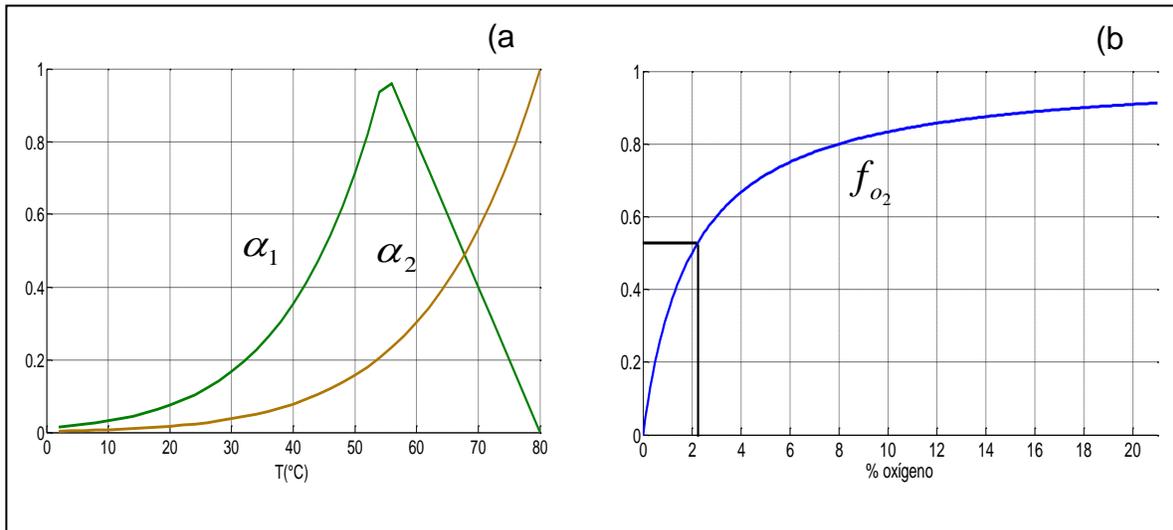


Figura 2.5. Funcionalidades del modelo cinético, a) temperatura y b) % de oxígeno

El significado de los parámetros del modelo se muestra en el Apéndice 2.3

2.5. Solución numérica del modelo

2.5.1. Método explícito de diferencias finitas (MDF)

Para simplificar la solución del modelo se sustituyeron las siguientes variables adimensionales en las ecuaciones de la sección anterior:

$$(T_s, T_a) = \frac{T - T_{amb}}{T_0 - T_{amb}} \quad Z = \frac{z}{L} \quad C = \frac{C_0}{C_t} \quad r = \frac{r}{L} \quad (2.24)$$

El Apéndice 2.4 muestra las ecuaciones de la sección anterior en términos adimensionales.

La discretización de las derivadas se realizó mediante los términos truncados de la serie de Taylor (ecuaciones 2.25, 2.26 y 2.27). El orden de error para este método es 1 ($\varphi(\Delta x)$).

Discretización de la primera derivada con diferencias hacia adelante:

$$\begin{aligned} f'_z(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i+1,j}^k) - f(x_{i,j}^k)}{\Delta z} + [\varphi(\Delta x)] \\ f'_r(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j+1}^k) - f(x_{i,j}^k)}{\Delta r} + [\varphi(\Delta r)] \\ f'_t(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j}^{k+1}) - f(x_{i,j}^k)}{\Delta t} + [\varphi(\Delta t)] \end{aligned} \quad (2.25)$$

Discretización de la segunda derivada con diferencias centradas:

$$\begin{aligned} f''_z(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i+1,j}^k) - 2 \cdot f(x_{i,j}^k) + f(x_{i-1,j}^k)}{\Delta z} + [\varphi(\Delta x)^2] \\ f''_r(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j+1}^k) - 2 \cdot f(x_{i,j}^k) + f(x_{i,j-1}^k)}{\Delta r} + [\varphi(\Delta r)^2] \end{aligned} \quad (2.26)$$

Discretización de la primera derivada con diferencias hacia atrás:

$$\begin{aligned}
 f'_z(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i-1,j}^k) - f(x_{i,j}^k)}{\Delta z} + [\varphi(\Delta x)] \\
 f'_r(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j-1}^k) - f(x_{i,j}^k)}{\Delta r} + [\varphi(\Delta r)]
 \end{aligned}
 \tag{2.27}$$

Donde x representa la variable independiente evaluada en el punto dado y f es la función que se desea evaluar, es decir T_a , T_s , C , CS , CX .

Una vez discretizadas las ecuaciones, se generó la siguiente malla computacional mostrada en la Figura 2.5. Donde los nodos en azul representan las condiciones de frontera axiales y los nodos en color rojo indican las condiciones de frontera radiales.

Los nodos en color negro son resueltos mediante las ecuaciones de recurrencia utilizando los puntos $(x_{i+1,j})$, $(x_{i-1,j})$, $(x_{i,j+1})$ y $(x_{i,j-1})$, cuyos valores iniciales se obtienen a partir de los valores conocidos en $(k-1)$, es decir en el tiempo anterior, y con las expresiones sustituidas por las condiciones de frontera tal como se indica en la parte central de la Figura 2.6 con los nodos sombreados en azul.

Los nodos situados en las esquinas involucran el efecto combinado de ambas condiciones de frontera, por lo tanto su valor se obtiene utilizando los nodos de los extremos (partes sombreadas en rojo y amarillo).

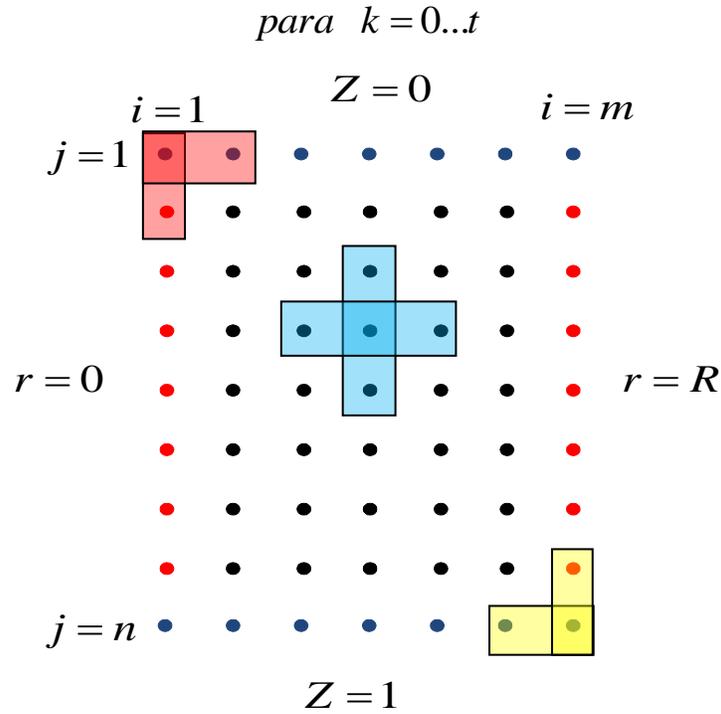


Figura 2.6. Malla computacional resuelta por MDF

2.5.2. Método de diferencias finitas acoplado con el método de integración de Runge-Kutta de 4 ° orden (MDF-RK4)

Para el empleo de este método, se discretizarón las ecuaciones de los balances de masa y energía (en términos adimensionales) con respecto al dominio del espacio (coordenadas r y z) de la siguiente forma:

Discretización de la primera derivada con diferencias centradas:

$$\begin{aligned}
 f'_z(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i+1,j}) - f(x_{i-1,j})}{2\Delta z} + [\varphi(\Delta x)^2] \\
 f'_r(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j+1}) - f(x_{i,j-1})}{2\Delta r} + [\varphi(\Delta r)^2]
 \end{aligned}
 \tag{2.28}$$

Discretización de la segunda derivada con diferencias centradas:

$$\begin{aligned}
 f_z''(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i+1,j}^k) - 2 \cdot f(x_{i,j}^k) + f(x_{i-1,j}^k)}{\Delta x} + [\varphi(\Delta x)^2] \\
 f_r''(x_{i,j}^k) &= \frac{f(x_{i,j+1}^k) - 2 \cdot f(x_{i,j}^k) + f(x_{i,j-1}^k)}{\Delta r} + [\varphi(\Delta x)^2]
 \end{aligned}
 \tag{2.29}$$

Para resolver los nodos situados a los extremos de la malla, las condiciones de frontera, se sustituyeron las ecuaciones 2.30 y 2.31 que se obtienen al aplicar la extrapolación de Richardson en la serie de Taylor. Con ello se logra obtener un error de segundo orden, por lo tanto, una mayor exactitud y estabilidad en el método.

Discretización de la primera derivada (nodos externos) con diferencias hacia adelante:

$$\begin{aligned}
 f_z'(x_{i,j}^k) &= \frac{-3 \cdot f(x_{i,j}^k) + 4 \cdot f(x_{i+1,j}^k) - f(x_{i+2,j}^k)}{2\Delta z} + [\varphi(\Delta x)^2] \\
 f_r'(x_{i,j}^k) &= \frac{-3 \cdot f(x_{i,j}^k) + 4 \cdot f(x_{i,j+1}^k) - f(x_{i,j+2}^k)}{2\Delta r} + [\varphi(\Delta x)^2]
 \end{aligned}
 \tag{2.30}$$

Discretización de la primera derivada (nodos externos) con diferencias hacia atrás:

$$\begin{aligned}
 f_r''(x_{i,j}^k) &= \frac{3 \cdot f(x_{i,j}^k) - 4 \cdot f(x_{i,j-1}^k) + f(x_{i,j-2}^k)}{2\Delta r} + [\varphi(\Delta x)^2] \\
 f_z''(x_{i,j}^k) &= \frac{3 \cdot f(x_{i,j}^k) - 4 \cdot f(x_{i-1,j}^k) + f(x_{i-2,j}^k)}{2\Delta z} + [\varphi(\Delta x)^2]
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

Al agrupar todas las ecuaciones se obtiene:

$$\left(\frac{df'(x)}{dt}\right)_{i,j} = g(x)_{i,j} + [\varphi(\Delta x)^2] \quad (2.32)$$

Donde $g(x)_{i,j}$ representa el conjunto de ecuaciones algebraicas, obtenidas a partir de la discretización de los términos diferenciales. Las ecuaciones resultantes se resuelven con respecto del tiempo, mediante el método de integración Runge-Kutta con aproximaciones de cuarto orden.

En la Figura 2.7 se muestra la malla computacional resuelta por este método. La discretización del modelo se presenta en el Apéndice 2.4.

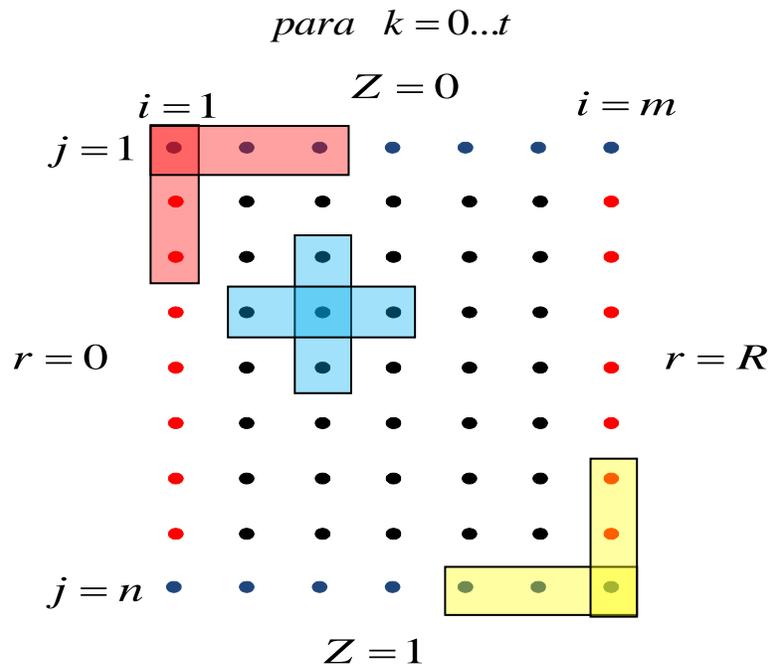


Figura 2.7. Maya computacional resuelta por MDF-RK4

La solución por ambos métodos se muestra en el Apéndice 2.4.

2.6. Análisis de sensibilidad

El valor inicial de los parámetros para este análisis se muestra en el Tabla 2.2 donde los coeficientes de transferencia D_{effz} , λ_{effz} y λ_{effr} fueron calculados a partir de correlaciones empíricas mientras que, el valor de las constantes cinéticas se obtuvo directamente de la literatura. Cada parámetro se varió $\pm 50\%$ con respecto a su valor inicial y se introdujo al programa, posteriormente a los valores de las variables de respuesta (oxígeno y temperatura) se les determinó la desviación estándar con respecto al valor inicial.

Tabla 2.2. Parámetros del modelo para el análisis de sensibilidad

símbolo	Nombre	Valor inicial	Referencia
K_{O_2}	Coeficiente medio de saturación	0.08	(Zili & Nasrallah, 1999)
E_a	Energía de activación (kcal/kg)	14.7	(Nakayama et al., 2007)
Y	Rendimiento sustrato-biomasa	0.50	(Nakayama et al., 2007)
D_{effz}	Difusividad efectiva en z (m ² /s)	3.89x10 ⁻⁵	(Zili & Nasrallah, 1999)
H	Coeficiente de transferencia (Kcal/m ³ .s.°K)	6.0x10 ⁻³	(Zili & Nasrallah, 1999)
Y_{O_2}	Rendimiento de oxígeno	1.5	(Chad et al., 2001)
λ_{effz}	Conductividad efectiva en z (Kcal/m.s.°K)	7.33x10 ⁻⁵	(Zili & Nasrallah, 1999)
λ_{effr}	Conductividad efectiva en r (Kcal/m.s.°K)	3.27x10 ⁻⁵	(Zili & Nasrallah, 1999)
μ	Crecimiento específico (1/h)	1.24x10 ⁻⁴	(Nattakorn & Testsuya, 2008)
μ_b	Decaimiento (1/h)	1.0x10 ⁻⁵	(Nakayama et al., 2007)
E_{a2}	Energía de activación (kcal/kg)	4.1x10 ⁻¹	(Nattakorn & Testsuya, 2008)

2.7. Ajuste de parámetros

El ajuste de parámetros se realizó en FORTRAN mediante la subrutina GREEG donde se introdujo el programa para la solución numérica con MDF-RK4. Para esto la subrutina modifica el valor inicial de cada parámetro, compara los datos obtenidos en el modelo (concentración de oxígeno y temperatura de la composta) con los datos de cada experimento (experimentos # 1, # 2 y # 3) hasta obtener la mejor aproximación. Para ello, fue necesario fijar los intervalos de variación en cada parámetro con base al análisis de sensibilidad y su efecto en el modelo. Los parámetros seleccionados para el ajuste se muestran en la Tabla 2.3, donde también se aprecian los intervalos de variación (Valores máximos y mínimos) empleados en la subrutina.

.Tabla 2.3. Ajuste de parámetros

Parámetro	Valor inicial	Valor máximo	Valor mínimo
E_a (kcal/kg)	11.0	13.0	8.0
Y_{O_2} (kg O ₂ /kg SVB)	0.2	0.5	0.1
D_{effz} (m ² /s)	1.0×10^{-6}	4.0×10^{-6}	5.0×10^{-7}
Y (kg SSV/kg SVB)	2.0	4.0	0.5
μ (1/s)	6.0×10^{-5}	9.0×10^{-5}	4.0×10^{-5}
μ_b (1/s)	9.5×10^{-5}	12.5×10^{-5}	6.5×10^{-5}
E_{a2} (kcal/kg)	1.0×10^{-1}	5.0×10^{-1}	0.5×10^{-1}
λ_{effz} (kcal/m.s.°K)	3.0×10^{-5}	4.0×10^{-5}	2.0×10^{-5}
λ_{effr} (kcal/m.s.°K)	3.0×10^{-5}	4.0×10^{-5}	2.0×10^{-5}

3. Resultados y discusión

3.1. Diseño del sistema experimental

3.1.1. Retos de diseño

Uno de los objetivos en el presente trabajo fue lograr el auto-calentamiento del sistema experimental ($T_R > 50$ °C). Esto fue especialmente importante si se considera que la masa inicial de 56 kg de material, empleada en este trabajo, fue 10 veces menor que la masa mínima necesaria para llevar a cabo el auto-calentamiento en una pila de composta (Gómez Tovar, 2007). Es decir, la relación área de transferencia de calor /volumen de generación de energía (A_T/V_G ; ecuación 3.1) fue cuatro veces mayor en el reactor tubular que en una pila de composta de 500 kg.

$$\begin{aligned} \left(\frac{A_T}{V_G} \right)_{\text{Pilacomposta}} &= \frac{3}{r_{\text{pila}}} = \frac{3}{0.75} = 4 \\ \left(\frac{A_T}{V_G} \right)_{\text{Reactortubular}} &= \frac{2}{r_{\text{reactor}}} = \frac{2}{0.127} \approx 16 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Por este motivo, en el balance de calor ecuación 2.3, a diferencia del modelo utilizado por Chad (2001), fue importante considerar las pérdidas de calor hacia el exterior $k_i(\Delta T)$.

3.1.2. Obtención del coeficiente global de transferencia de calor U y de la entalpía de reacción H_{rx}

Conocer el valor de ambos parámetros termodinámicos es de especial interés en este trabajo ya que permitió simular de manera precisa el comportamiento de la temperatura en el sistema propuesto.

Con el valor de U fue posible establecer la cantidad de aislante necesario para reducir las pérdidas de calor y así mantener la temperatura de pasteurización en el

reactor. Inicialmente se determinó U_{exp} de forma experimental (Sección 2.7.2), considerando el material aislante de la Tabla 3.1, para posteriormente calcular el valor del coeficiente convectivo mediante la ecuación 3.2. Con estos valores se calcularon nuevos coeficientes U_{Teor} cambiando la composición y el espesor del aislante para decidir, en base al costo/beneficio, la mejor composición del aislante.

$$U = \frac{1}{A_0 \left(\frac{1}{A_0 h_0} + \sum_{j=1}^n \frac{\ln \left(\frac{r_j}{r_{j-1}} \right)}{k_{j-1,j}} + \frac{1}{A_i h_i} \right)}$$

(Ec. 3.2)

Tabla 3.1. Aislamiento térmico

Coeficiente Global (KJ/h·m²)	Resistencias conductivas (h·°K/KJ)	Resistencias Convectivas (h·°K/KJ)		
U	$\sum_{j=1}^n \frac{\ln \left(\frac{r_j}{r_{j-1}} \right)}{k_{j-1,j}}$	$\frac{1}{A_0 h_0} + \frac{1}{A_i h_i}$	Aislante	Reducción de pérdidas de calor
3.99 _{exp}	1.81	7.01x10 ⁻¹	1 1/2" Fibra de vidrio. 0.05" PVC	
2.44 _{Teor}	2.54	6.93x10 ⁻¹	1 1/2" Fibra de vidrio 0.5" Polietileno 0.05" PVC	28%
1.50 _{Teor.}	4.63	6.18x10 ⁻¹	4" Fibra de vidrio 0.5" Polietileno 0.05" PVC	38%
1.21 _{Teor.}	5.94	5.82x10 ⁻¹	6 " Fibra de vidrio 0.5" Polietileno 0.05" PVC	19%
1.49 _{exp}	4.63	6.18x10 ⁻¹	4" Fibra de vidrio 0.5" Polietileno 0.05" PVC	

Se eligió el aislamiento de la fila cuatro (sombreada en azul) y se corroboró el valor de U_{teor} experimentalmente (última fila) para realizar los cálculos de simulación. La figura 3.1 muestra el ajuste de la ecuación 2.30 a los datos experimentales para obtener el valor de U_{exp} a partir de la pendiente (k_t). Una vez comprobado el resultado anterior, se determinaron las pérdidas de calor con un aislamiento térmico de 6", las cuales fueron del 19%. Por lo tanto no se justifica el hecho de implementar un aislamiento térmico mayor a 4 ".

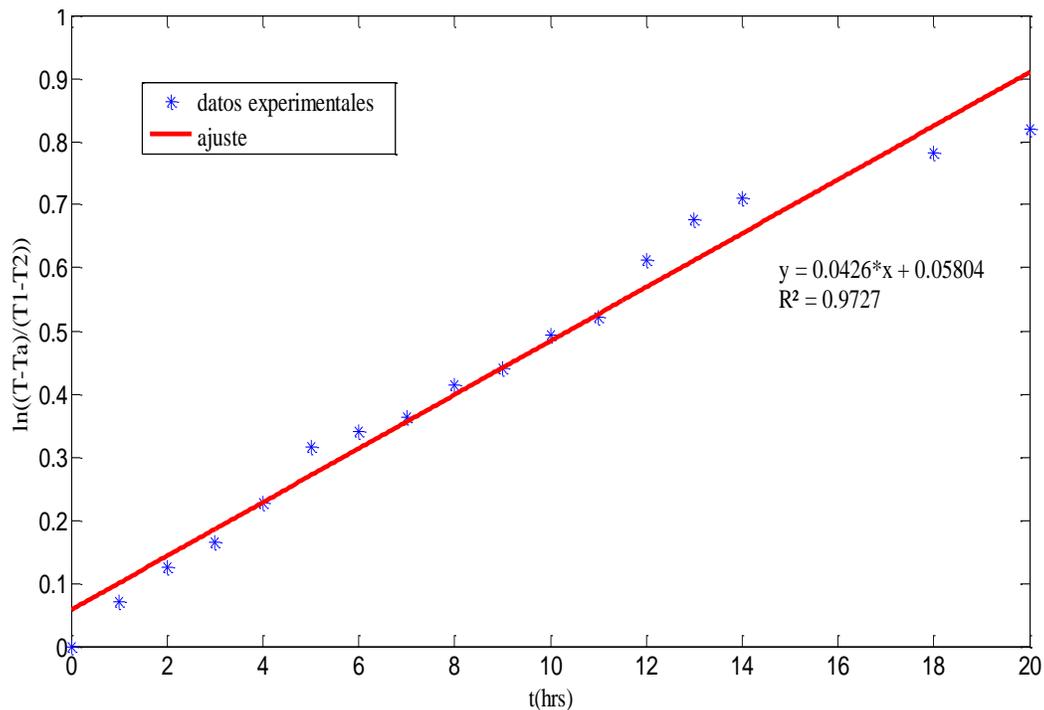


Figura 3.1. Determinación experimental de U

Por otra parte, la entalpía de reacción calculada para este trabajo mediante el análisis elemental de la composta se indica en la Tabla 3.2, donde la comparación con diferentes datos reportados en la literatura muestra que el calor de reacción calculado en este trabajo fue menor, posiblemente debido a la composición de la mezcla de material. El pasto, que aporta la mayor cantidad de energía, fue el componente que se encontró en menor cantidad (10%). El valor obtenido de H_{rx} fue especialmente importante, ya que de él dependía si el reactor contaba con el potencial para alcanzar temperaturas mayores a 50°C.

Tabla 3.2. Calor de reacción

Material	H_{RX} (kcal/kgSSV)	Fuente
Composta	2780	Este trabajo
Composta	3822	Chad et al., 2001
Composta	3678	Petric & Slimbasic 2008
Composta	4593	Hougot & Jenkins, 1972
Composta	4180	Nakayama et al ., 2007
Pasto	4447	Haug,1993
Lodo	2950	Haug,1993
Tronquillo	3060	Haug,1993

3.1.3. Simulación de las ecuaciones de diseño

Las aproximaciones de las ecuaciones 2.1-2.3 acopladas con el modelo cinético de primer orden (ecuación 1.1) se muestran en las Figuras 3.2 a 3.4. En relación al balance de calor (ecuación 2.3) la simulación describe un proceso de compostaje con pérdidas de calor despreciables ($A_T/V_G \leq 4$). Esto puede observarse en la Figura 3.2 en la cual la simulación predice que la temperatura alcanzará 60°C hasta por 5 días. Este comportamiento describe de forma muy aproximada los resultados experimentales obtenidos por Alatríste et al (2011) que logró mantener una temperatura mayor a 60 °C en una pila de composta durante más de 15 días. Este punto se discutirá más ampliamente en la sección 3.1.4.

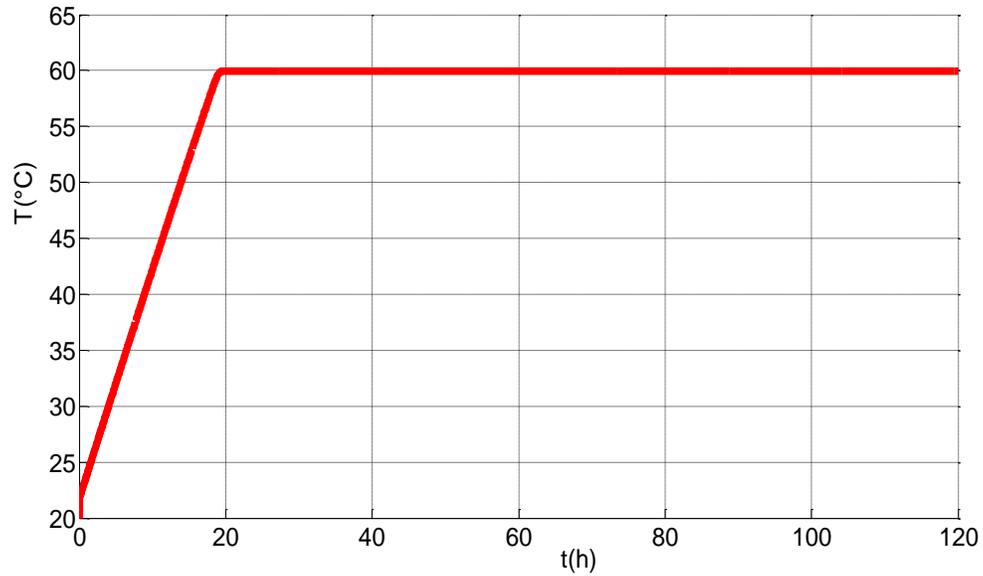


Figura 3.2. Simulación de la temperatura obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de energía (ecuación de diseño).

En lo que corresponde al oxígeno (Figura 3.3, ecuación 2.2), la simulación predice un rápido decremento de la concentración de O_2 al inicio, debido a su consumo por los microorganismos durante la fase mesofílica. Conforme la temperatura aumenta, la utilización de éste disminuye debido a la inhibición de los microorganismos a altas temperaturas ($T > 60^\circ C$).

En el caso de la humedad, la simulación (Figura 3.4, ecuación 2.1) inició con un 81% de humedad y aumentó como resultado de la biodegradación, posteriormente disminuyó conforme se mantuvo la temperatura de pasteurización.

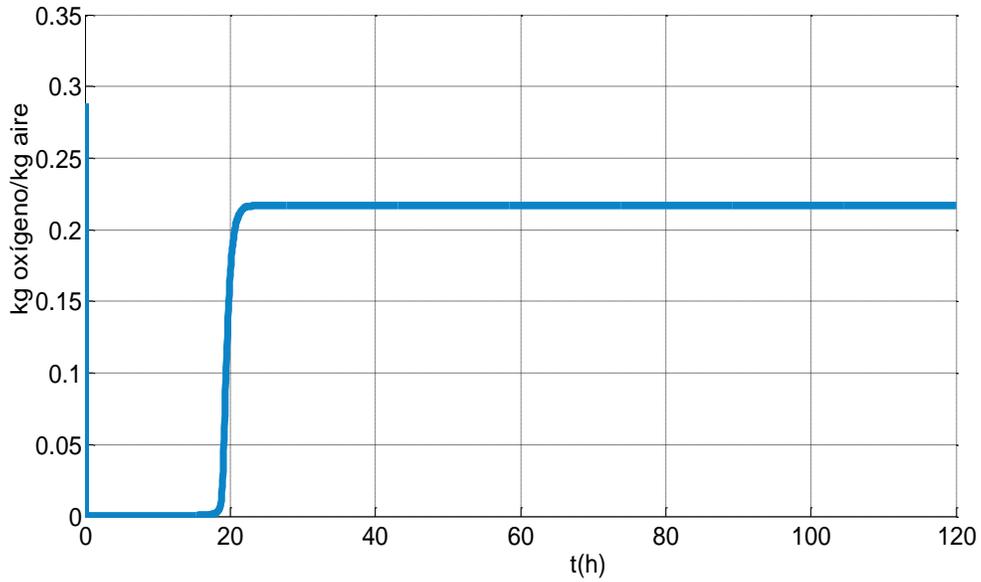


Figura 3.3. Simulación de la concentración de oxígeno obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de masa para el oxígeno (ecuación de diseño).

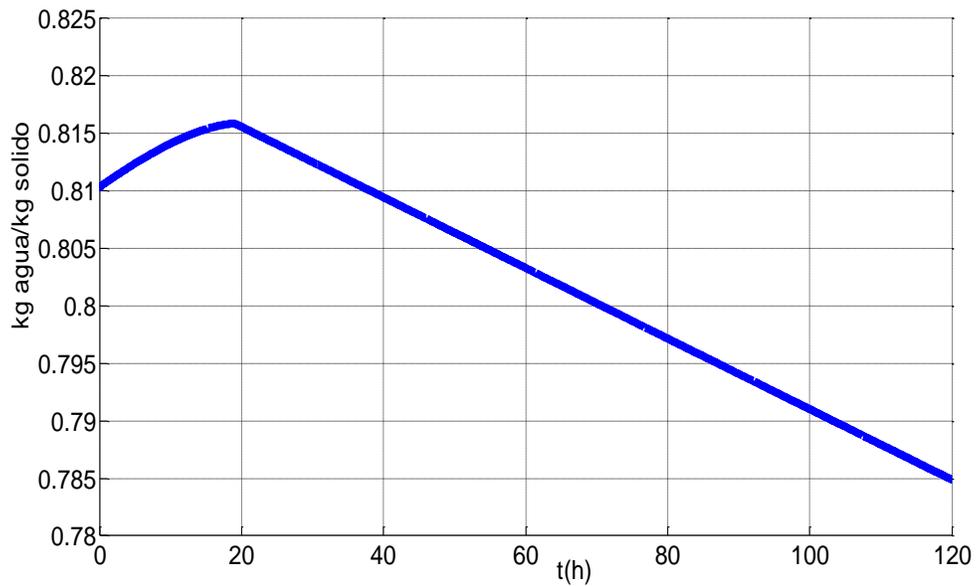


Figura 3.4. Simulación del contenido de humedad obtenida con el modelo cinético de primer orden acoplado al balance de masa para el oxígeno (ecuación de diseño).

3.1.4. Comparación de los modelos cinéticos

La Figura 3.5 muestra el comportamiento de la temperatura descrito por el balance de calor (ecuación 2.3) acoplado a los tres modelos cinéticos descritos en la sección 1.3.2. En dicha Figura se aprecia que la temperatura supera los 70 °C utilizando los tres modelos, sin embargo la forma en que ocurre dicho evento varía conforme al modelo cinético utilizado. Para el modelo # 1 la variación de la constante de velocidad cinética con respecto de la temperatura está en función del CTIM (ecuación 1.4) que es una función Gaussiana. Por otro lado en el modelo # 2 la constante cinética varía con respecto de la temperatura mediante una función exponencial y este efecto se logra ver en la gráfica hasta los 60°C, posteriormente la funcionalidad de la constante es lineal hasta los 70°C (ecuaciones 1.8 y 1.9). Por último para el modelo # 3 la constante de velocidad cinética tiene una funcionalidad en forma de potencia (ecuación 1.12). Este modelo a diferencia de los anteriores no tiene como límite la temperatura sino el agotamiento del sustrato, es decir, la temperatura podría incluso ir más allá de 80°C si el sustrato no se agota.

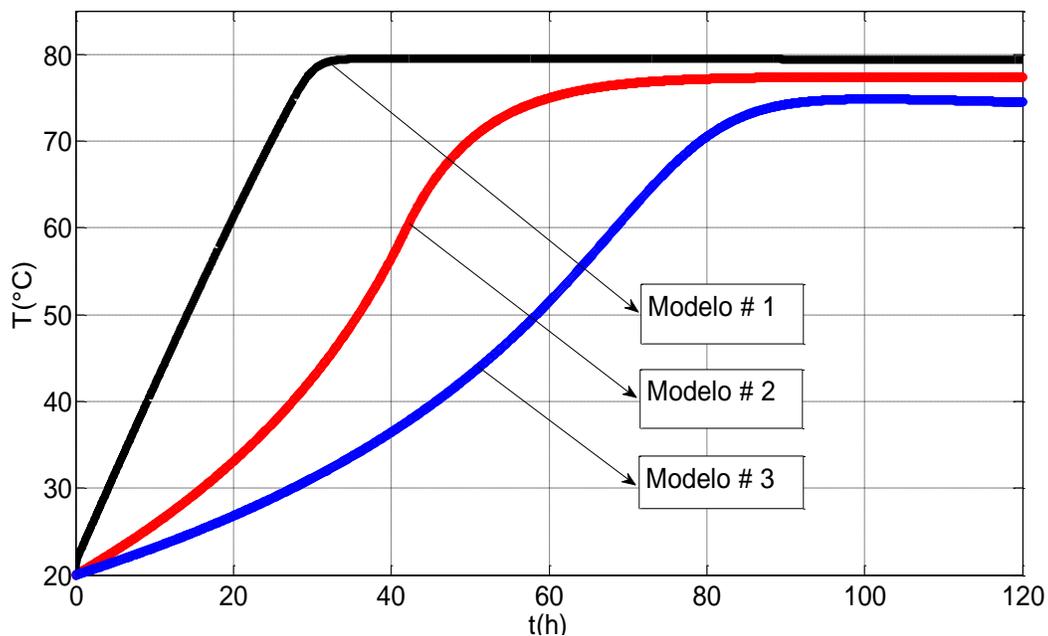


Figura 3.5. Simulación de la temperatura obtenida con el balance de energía (ecuación de diseño) acoplado con el modelo cinético de primer orden (Modelo # 1), Modelo cinético de Contois (Modelo # 2) y Modelo cinético de primer orden para compuestos de lenta y rápida generación (Modelo # 3).

El modelo cinético de Contois, acoplado con los balances de masa y calor (modelo # 2) representó de forma más aproximada el sistema experimental, utilizando $\mu_b = 0.6 \text{ h}^{-1}$ (Figura 3.6). Este fue el motivo de su selección para su aplicación posterior en el modelo desarrollado en el presente trabajo a partir de las ecuaciones 2.5-2.19.

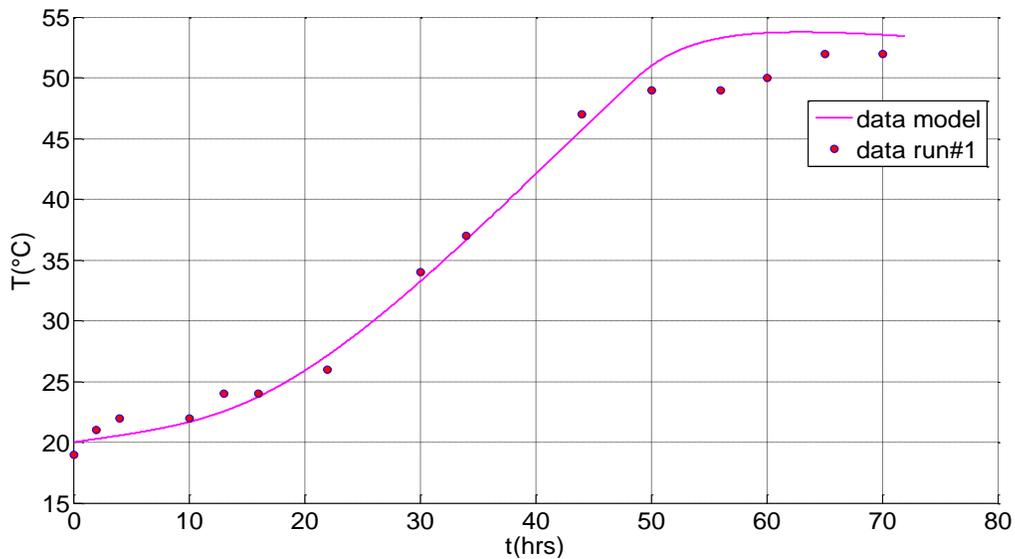


Figura 3.6. Comparación de la simulación obtenida con el Modelo # 2 y los datos experimentales.

3.2. Construcción del sistema experimental

El sistema experimental sufrió tres modificaciones de diseño y condiciones de operación (Figura 3.7). Estas modificaciones fueron orientadas por las simulaciones de las ecuaciones de diseño de la sección anterior.

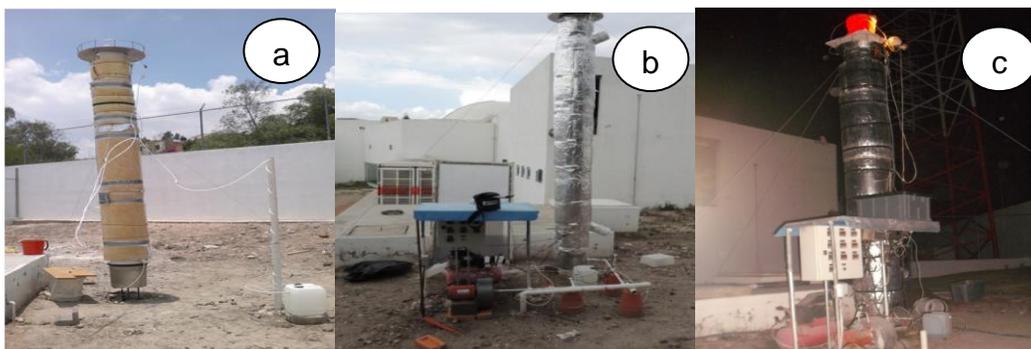


Figura 3.7. Evolución del sistema experimental

Inicialmente se trabajó con un reactor de 3.2 m de altura (Figura 3.7a) cubierto por una sola capa de aislante, el reactor fue alimentado con aire en condiciones ambientales y se monitoreó la temperatura en el centro de la columna. Se alcanzó una temperatura máxima de 48 °C que se mantuvo durante 7 horas debido a las pérdidas de calor.

Para mejorar el desempeño del reactor (Figura 3.7b) el aislante y la columna fueron recubiertos con aluminio, además se mantuvo húmedo el lecho al adicionar diariamente 3 l de agua. Con estas modificaciones se logró una temperatura de 66 °C durante 13 horas y un aumento en la humedad del lecho ($W = 80\%$). Se recolectaron cerca de 13 litros de lixiviado en cinco días (2.6 l/día) lo que provocó un efecto de lavado en el reactor, es decir una remoción de nutrientes, biomasa y sustrato soluble.

En el siguiente experimento (Figura 3.7c) se calculó el valor de U y se decidió añadir una capa más de aislante (fibra de vidrio con 1 1/2" de espesor). La temperatura alcanzó 50°C y se mantuvo por más de cinco días (Figura 3.8).

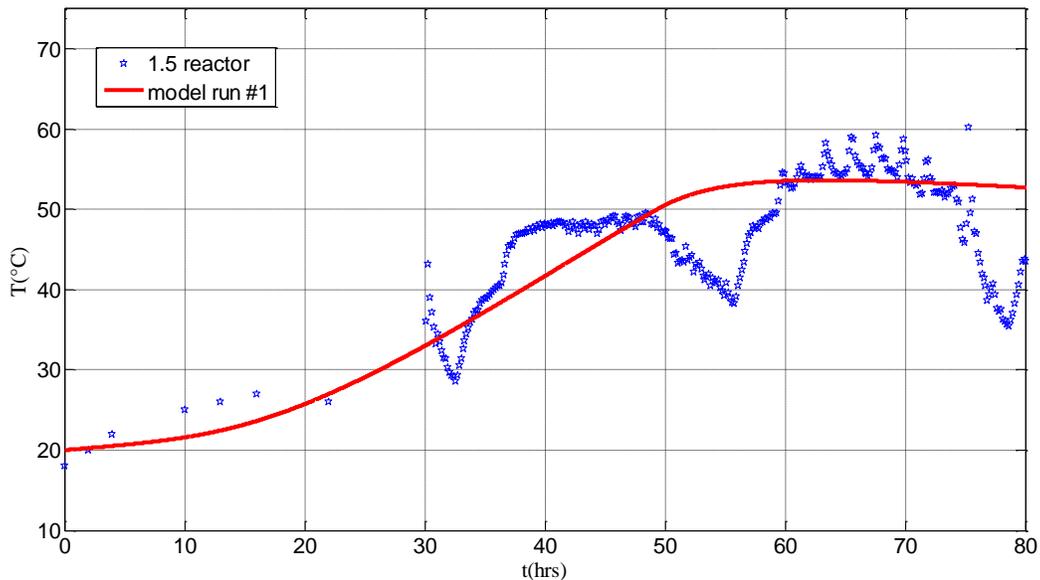


Figura 3.8. Comparación de los datos experimentales con el Modelo # 2.

Para evitar el lavado excesivo y mantener el lecho húmedo se implementó un sistema de humidificación que introduce aire saturado a una cierta temperatura. Se probó este sistema mediante tres condiciones de operación (Figura 3.9), en la primera se introdujo aire en condiciones ambientales y se observó que la temperatura aumentó de forma gradual hasta 35°C. Posteriormente se humidificó el aire a la temperatura ambiente, esto tuvo un efecto inmediato sobre la temperatura del lecho la cual alcanzó 60°C; al implementar una tercera condición de operación manteniendo el aire húmedo a una temperatura de 40°C se logró incrementar la temperatura del lecho a 80°C y se redujo la cantidad de lixiviado a 200 ml/d, el agua que se introdujo en el aire saturado fue calculada en 203 ml/d. Aunque la humedad del lecho no permanece constante, lo anterior fue una premisa para considerarla prácticamente constante.

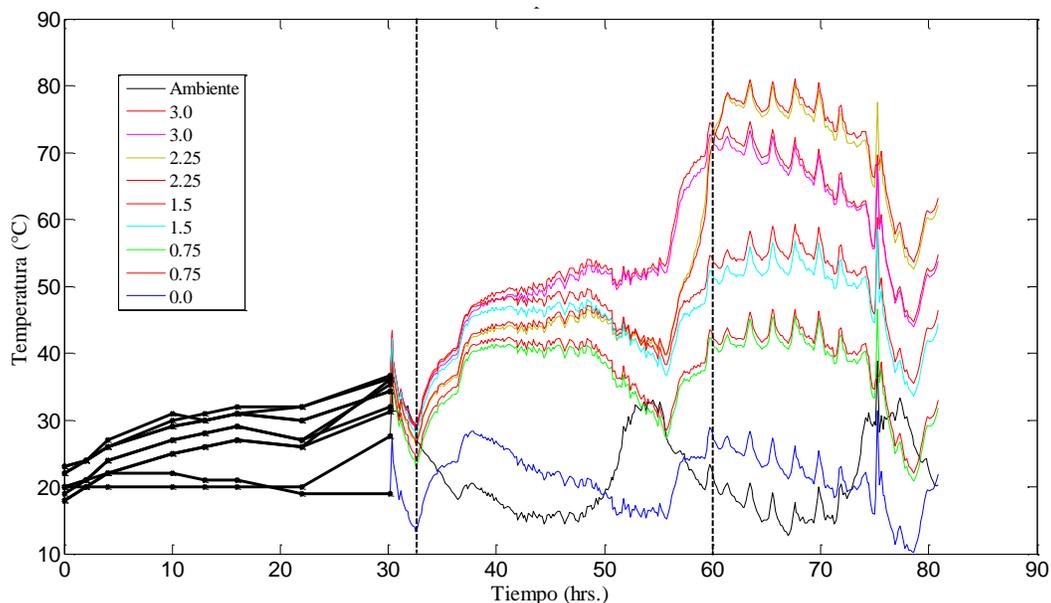


Figura 3.9. Perfil de temperaturas a lo largo del reactor. Los números indican la distancia (m) entre los puntos de muestreo, desde la entrada en $L=0.0$ m hasta la salida en $L=3.0$ m.

Para observar los efectos ambientales e instrumentales se desarrolló un experimento con la columna vacía, para lo cual se midió la temperatura en tres puntos; T1 es la temperatura obtenida a 0.3 m de la entrada, T2 al centro de la columna y T3 a 0.3 m de la salida del reactor Figura 3.10.

La temperatura de entrada T1 fue manipulada mediante un control de lazo cerrado con el sistema de saturación (ver sistema de saturación en la Figura 2.7 (elementos 1 y 2)). El efecto oscilatorio en T1 es debido a la distancia existente entre el elemento controlador, que es el termopar colocado a la entrada del reactor y el elemento controlado, que es el calentador colocado dentro del humidificador.

Para reducir estas oscilaciones, (Figura 3.11) la tubería de alimentación de aire se introdujo dentro del aislante para evitar el enfriamiento del aire saturado que es conducido hacia el reactor. También se observa que la temperatura ambiente, TA, no afecta el comportamiento de T1, T2 o T3, que son las temperaturas al interior del reactor.

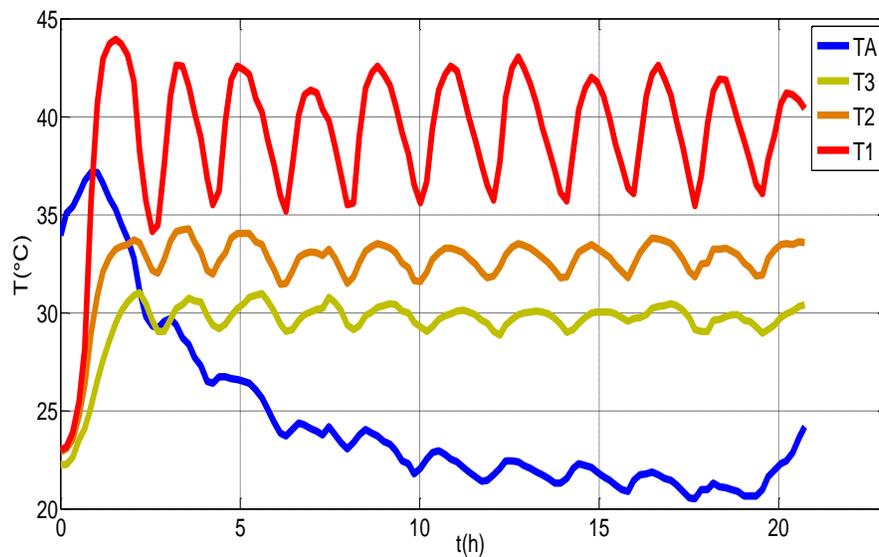


Figura 3.10. Evolución de la temperatura en diferentes posiciones axiales dentro del reactor sin composta.

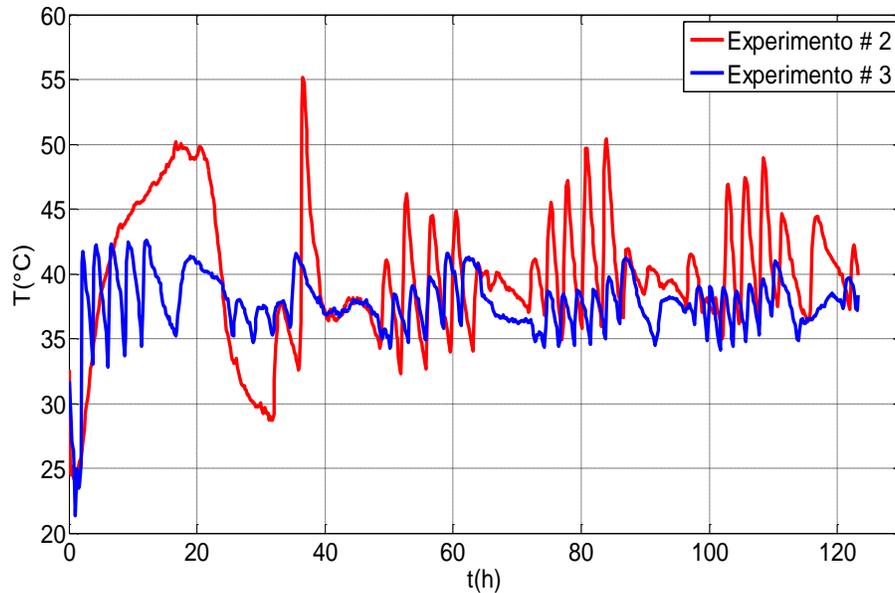


Figura 3.11. Oscilación de la temperatura a la entrada al reactor; experimento #2 efecto sin amortiguado, experimento #3 efecto amortiguado.

3.3. Discretización y simulación de las ecuaciones de transferencia

En las Figuras 3.12 y 3.13 se muestra la solución del modelo (ecuaciones 2.5-2.19) referentes a las secciones 2.3.3 y 2.3.4 con la malla computacional, utilizando $i=100$ para la dimensión z y $j=20$ para la dimensión r para el MDF. De la misma forma para el MDF-RK4 con $i=20$ y $j=6$ para las dimensiones z y r respectivamente.

Con ambos métodos se logra describir el comportamiento de la temperatura en el reactor a lo largo del tiempo y el espacio. Sin embargo el método de MDF-RK4 tuvo un menor tiempo computacional y una estabilidad que no mostró el MDF, en la Figura 3.12 a las 87 h en $i=0$ y $j=6$ se logra observar el inicio de una perturbación que posteriormente desequilibra el sistema.

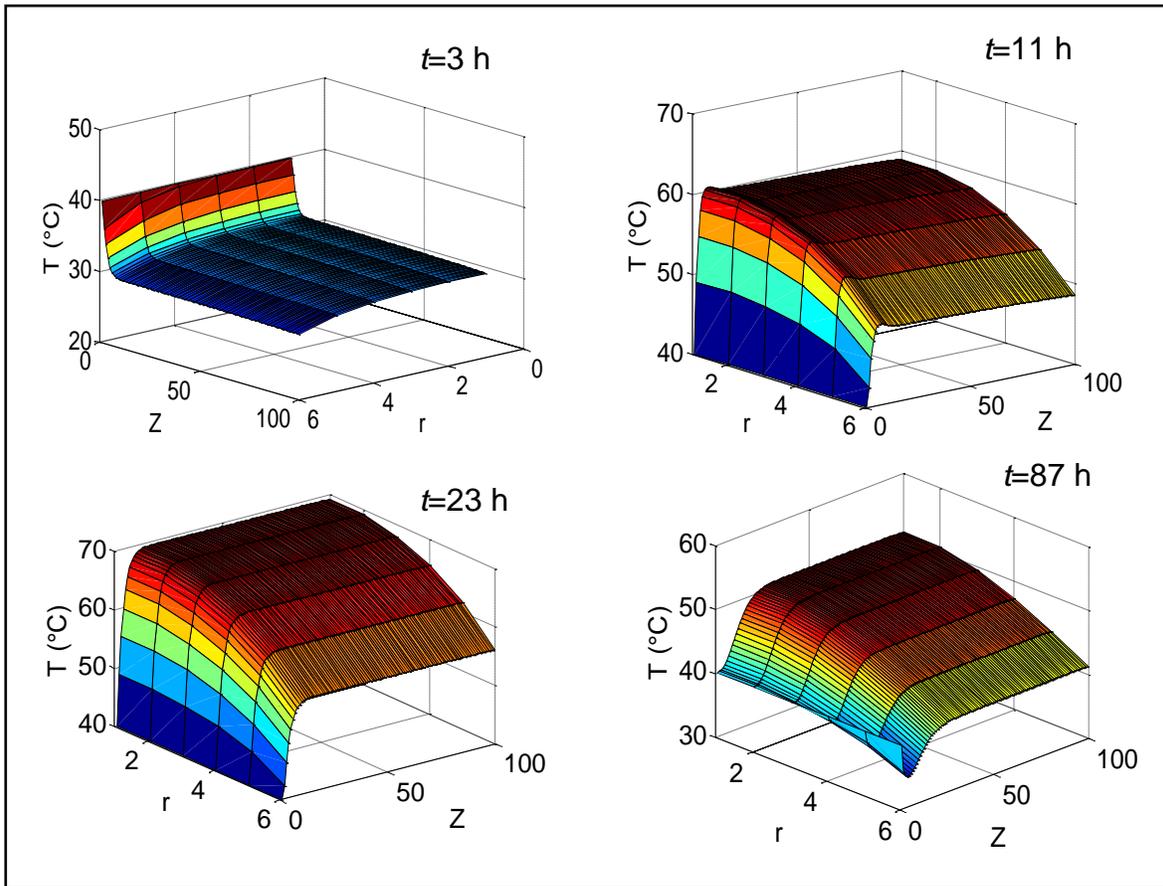


Figura 3.12. Simulación del modelo resuelto por MDF

El método MDF-RK4 se escogió para el ajuste de parámetros y la simulación del sistema propuesto, donde fue importante considerar el tamaño de paso. La Tabla 3.3 muestra el valor de la variable de respuesta, la temperatura (T en $^{\circ}\text{C}$), con diferentes incrementos de tiempo (Δt) y de espacio ($\Delta z/\Delta r$). Es posible ver la estabilidad del método con diferentes tamaños de paso.

Tabla 3.3. Determinación del tamaño de paso y número de divisiones

Tamaño de paso	Δt ($\Delta z/\Delta r$)	Δt ($\Delta z/\Delta r$)	Δt ($\Delta z/\Delta r$)	$\Delta z/\Delta r$ (Δt)	$\Delta z/\Delta r$ (Δt)
	5 (20/7)	3 (20/7)	1 (20/7)	100/7 (5)	20/17 (5)
Tiempo (hrs)	Temperatura (°C)				
3	31.264	31.264	31.264	31.207	31.291
7	49.809	49.809	49.809	49.733	50.036
10	63.649	63.649	63.649	63.614	63.49
16	70.702	70.702	70.702	70.692	70.478
22	72.399	72.399	72.399	72.396	72.183
28	72.358	72.358	72.358	72.359	72.18

Las simulaciones obtenidas mediante el MDF-RK4 programado en FORTRAN, se muestran en la Figura 3.13, se observa como la temperatura empieza a elevarse a las tres horas en $z>0$, debido a la entrada de aire saturado a 40 °C.

Es posible observar los efectos de las condiciones de frontera, por ejemplo la temperatura en $r=0$ y $0<z<20$ (centro del reactor) va disminuyendo conforme al modelo hasta que se aproxima a la condición de frontera en $r=6$ y $0<z<20$ (pared del reactor), también se puede ver como el punto $z=0$ $r=6$ es afectado tanto por la condición de frontera en la entrada como por la condición de frontera en la pared. Todos los demás puntos internos se van calculando en base a las condiciones de frontera, como se aprecia en las ecuaciones discretizadas (Apéndice 2.4), debido a esto es muy importante que cada punto en la frontera tenga el efecto de las condiciones establecidas en $z=0$ $z=L$ $r=0$ y $r=R$.

Por otra parte en la Figura 3.13 se muestra, a las 11 h, que la temperatura empieza aumentar debido al efecto cinético hasta las 25 h donde se alcanza la temperatura máxima, posteriormente disminuye debido a las pérdidas de calor por la pared sumado a que el término de generación de energía decrece debido a que el sustrato se consume y existe muerte celular a 55°C.

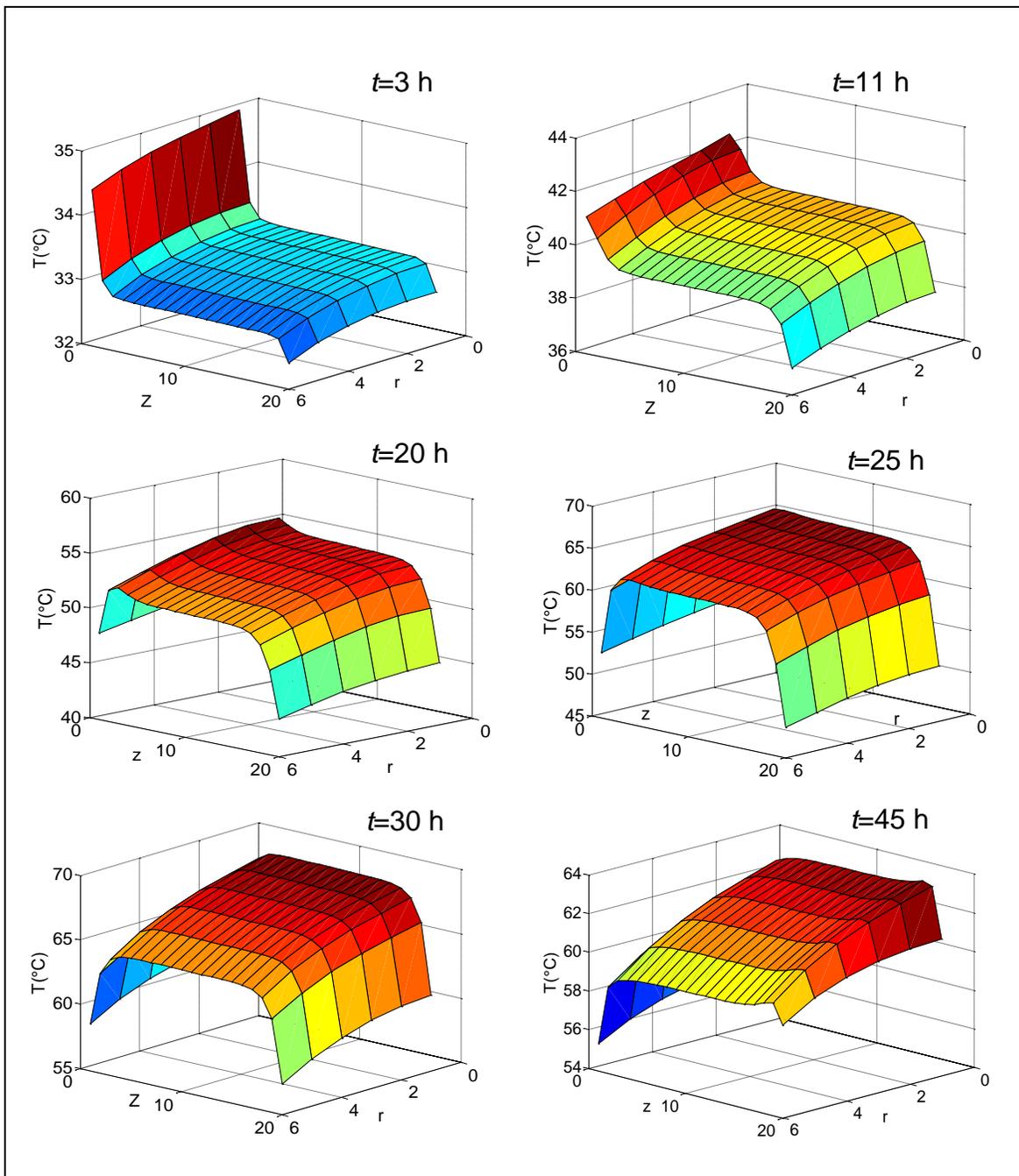


Figura 3.13. A. Simulación arrojada por el modelo resuelto por el MDF–RK4.

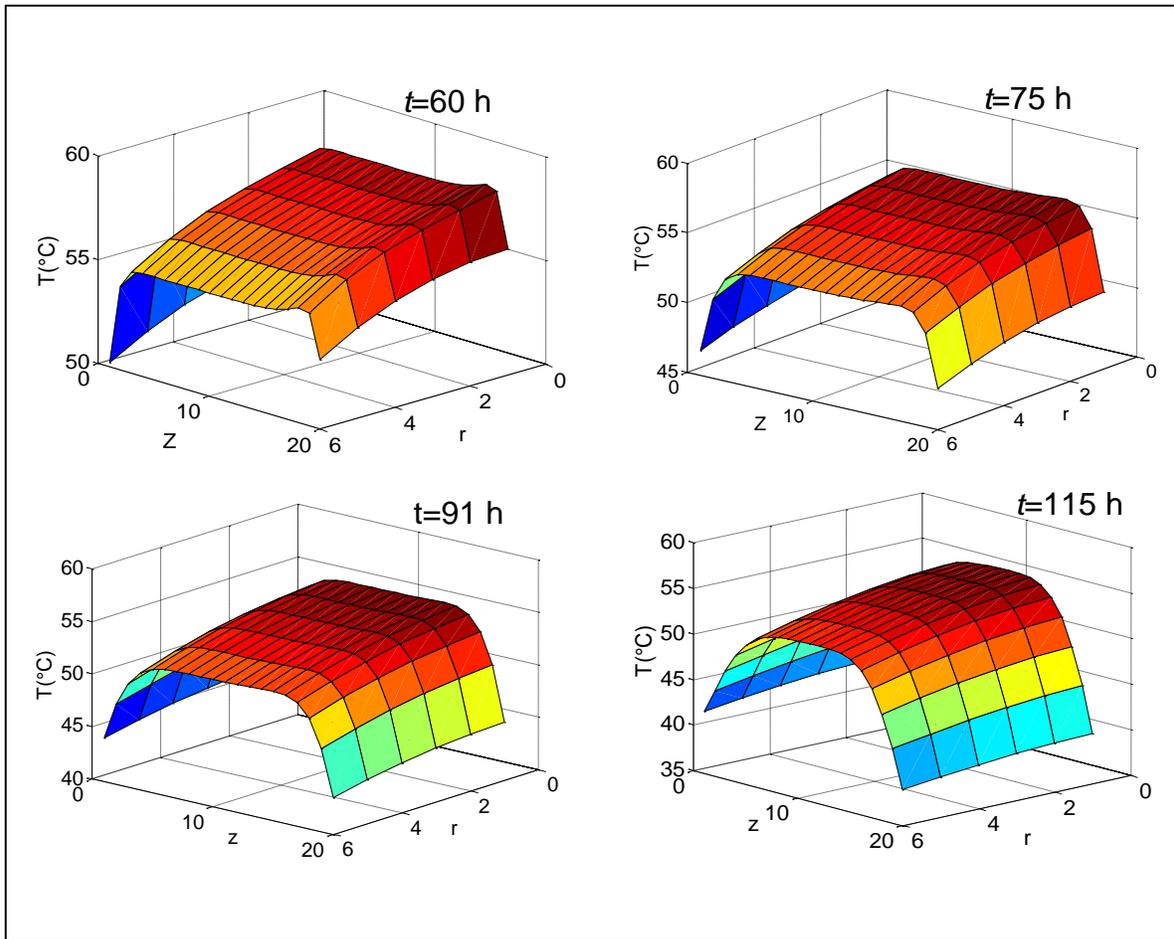


Figura 3.13. B. Simulación arrojada por el modelo resuelto por el MDF-RK4.

3.4. Análisis de sensibilidad

Encontrar los parámetros que más afectan el comportamiento del modelo es importante ya que permite establecer límites y valores iniciales de éstos antes de ajustarlos. Por otra parte, si el modelo no es afectado sensiblemente es posible utilizar un parámetro de la literatura para reducir tiempo computacional. En la sección 2.5 se describe como se desarrolló el análisis de sensibilidad.

En la Figura 3.14 se observó que los parámetros que más afectaron a la variable de respuesta (concentración de oxígeno) fueron μ_b , $\mu_{Y_{O_2}}$ y Y . Por otra parte,

la variable de respuesta temperatura es afectada por μ_b , μ , Y y λ_{effr} (Figura 3.15).

símbolo	K_{O_2}	E_a	Y	D_{effz}	H	Y_{O_2}	λ_{effz}	λ_{effr}	μ	μ_b	E_{a2}
Equivalencia	KO	Ea	Ysb	Diffz	Hg	Yo	dtaz	dtar	miuc	miub	Ea2

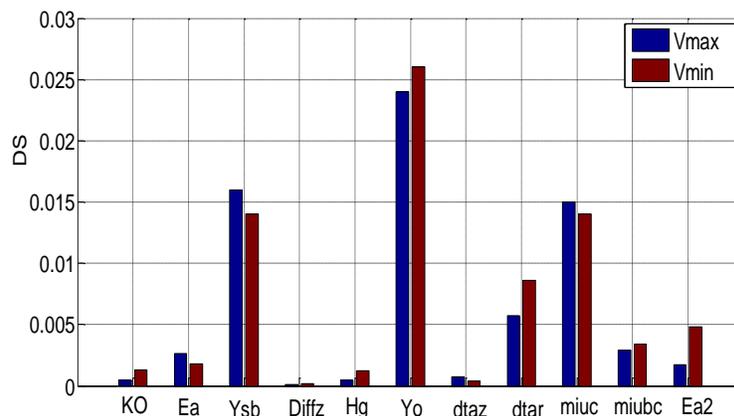


Figura 3.14. Desviación estándar (DS) para la concentración de oxígeno, dada una variación máxima (V_{max}) y mínima (V_{min}) en los parámetros del modelo

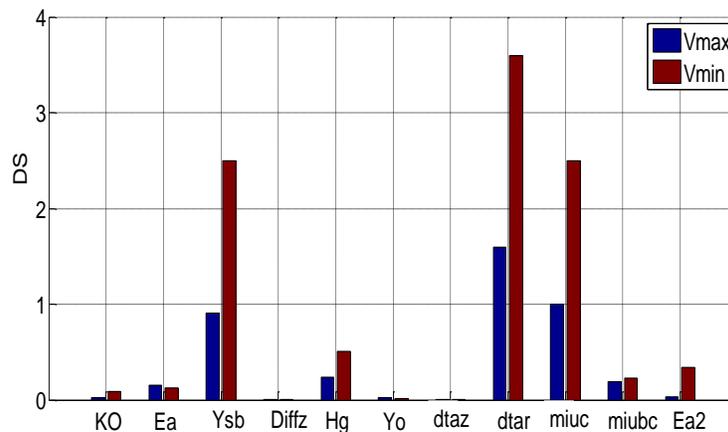


Figura 3.15. Desviación estándar (DS) para la temperatura, dada una variación máxima (V_{max}) y mínima (V_{min}) en los parámetros del modelo.

3.5. Funcionamiento del reactor y ajuste de parámetros

El objetivo de estos experimentos se centró en la obtención de datos experimentales para el ajuste del modelo. El modelo debe ser lo suficientemente robusto para poder describir diferentes condiciones de operación con sus parámetros constantes, de lo contrario cada parámetro se convertiría en una constante de ajuste que podría variar conforme varían las condiciones de operación.

Para ajustar los parámetros del modelo se desarrollaron tres experimentos, en la Tabla 3.4 se indican las condiciones de operación correspondientes a cada experimento en donde el número de Nusselt (Nu) y la constante de transferencia de calor en la interface (H) son dependientes de la longitud del reactor.

Tabla 3.4. Condiciones de operación

Condición	Experimento # 1	Experimento # 2	Experimento # 3
v_z (m/s)	1.48×10^{-4}	8.98×10^{-5}	4.69×10^{-5}
L (m)	2.7	1.6	1.6
m (kg)	58	36	36
$T _{z=0}$ (°C)	40	40	40
Nu_{az}	10.83	5.75	5.75
Nu_{ar}	19.6	13.7	13.7
Nu_{sz}	42.9	40	40
Nu_{sr}	107	783	783
H (kcal/m ³ ·s·°K)	4.30×10^{-3}	4.14×10^{-3}	4.14×10^{-3}
S_0 (kg SVB/kg)	6.93	7.26	7.26
X_0 (kg SSV/kg)	2.12	2.22	2.22

Las temperaturas que se muestran a continuación corresponden a los termopares que se mantuvieron operando durante los cinco días que duró cada experimento, al costado derecho de cada figura, se muestra la ubicación de los termopares en la columna del reactor. En las Figuras 3.16-3.18 se observan los perfiles axiales de temperatura en el reactor, la diferencia de temperaturas entre la parte superior, la parte media e inferior de la columna indican que el reactor no opera con una temperatura homogénea como las ecuaciones de diseño sugieren, si no con gradientes de temperatura axiales. Por último, la condición de frontera en $L=0$ (Figuras 3.17 y 3.18) no se mantiene exactamente en 40°C , pero se logra controlar en $\pm 2.5^{\circ}\text{C}$ en el experimento # 3.

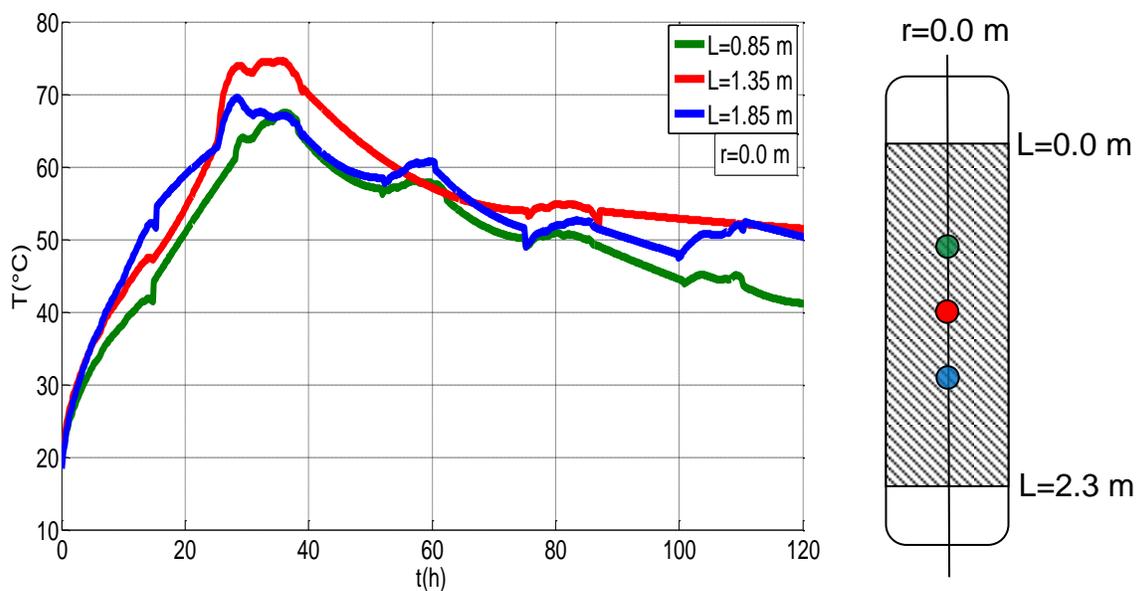


Figura 3.16. Comparación axial de temperatura durante el experimento # 1

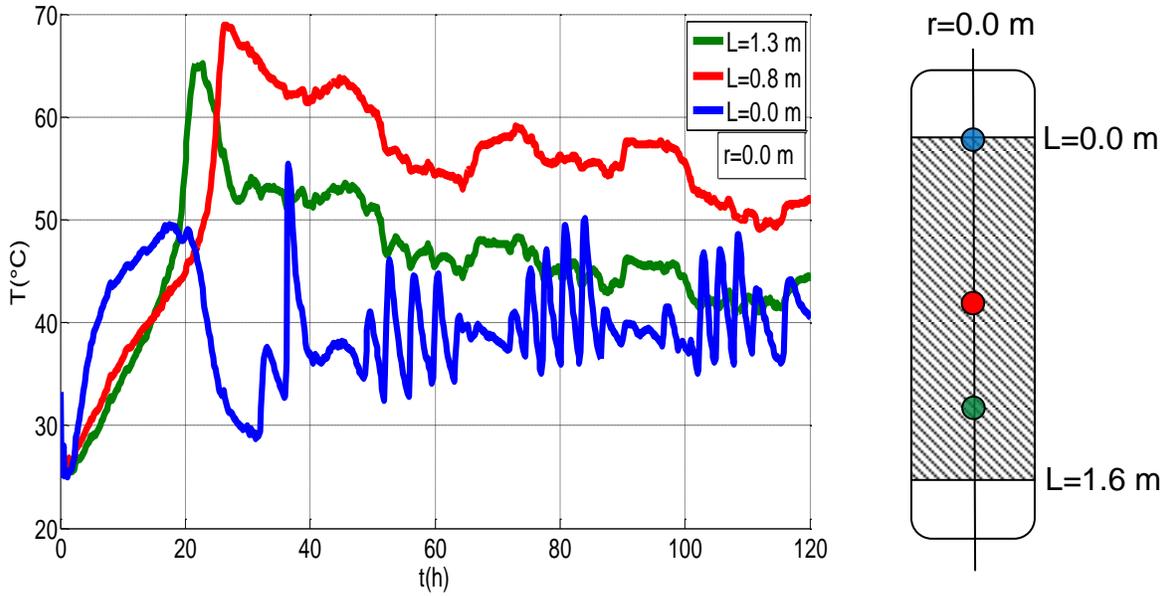


Figura 3.17. Comparación axial de temperatura durante el experimento # 2

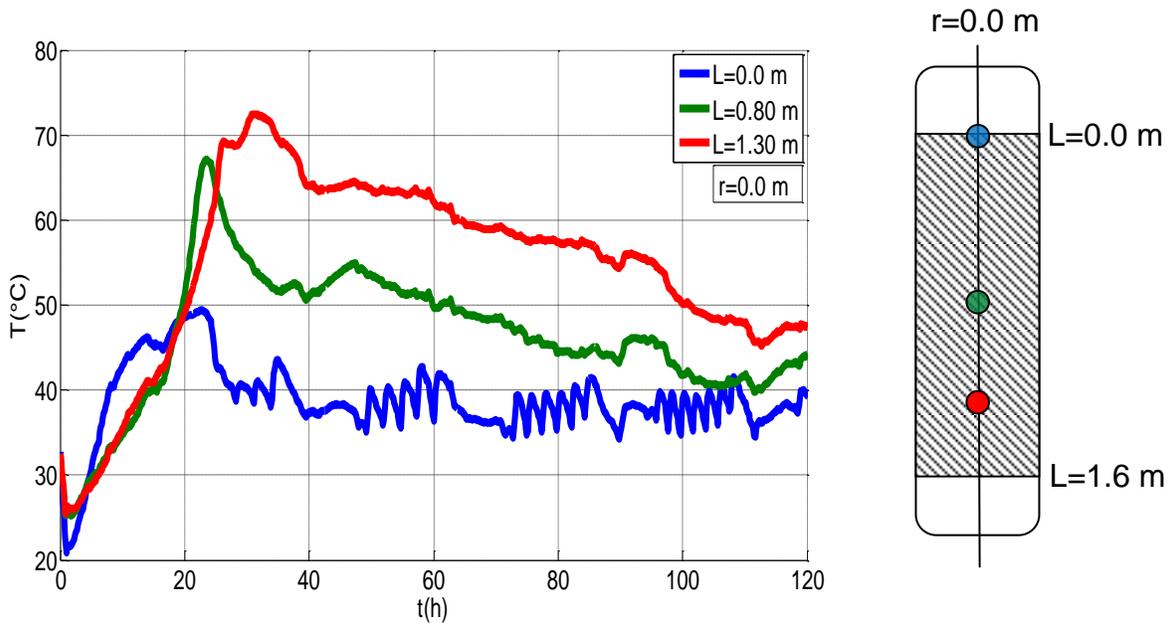


Figura 3.18. Comparación axial de temperatura durante el experimento # 3

En cuanto a los perfiles radiales, las Figuras 3.19-3.21 muestran que el gradiente de temperatura radial al inicio es mínimo, pero conforme la temperatura disminuye después de la hora 30 aumenta.

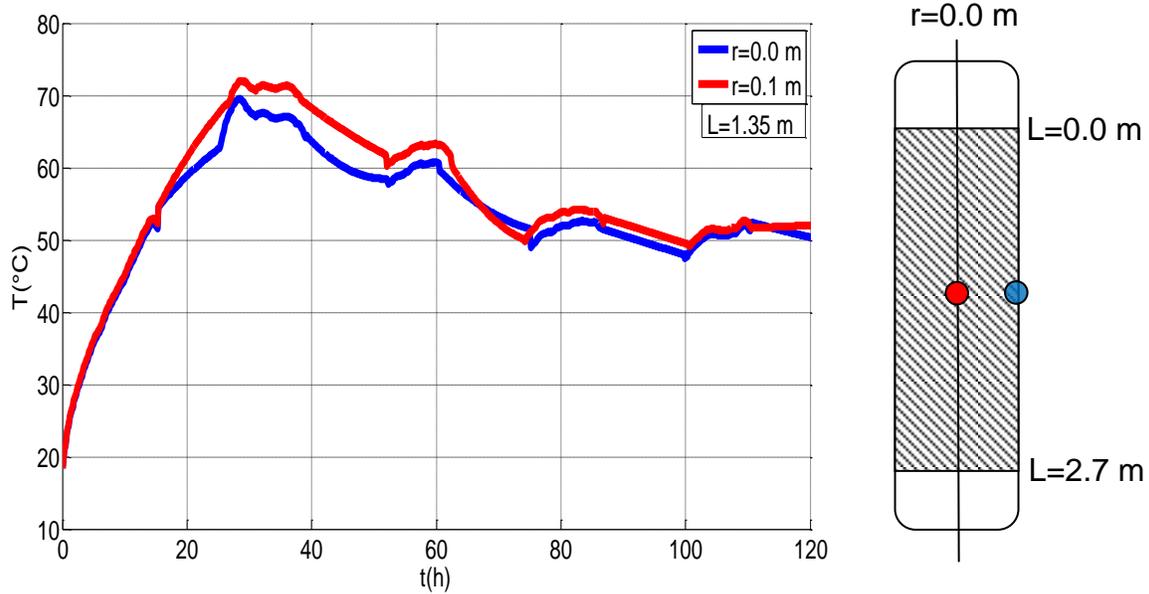


Figura 3.19. Comparación radial de temperatura durante el experimento # 1.

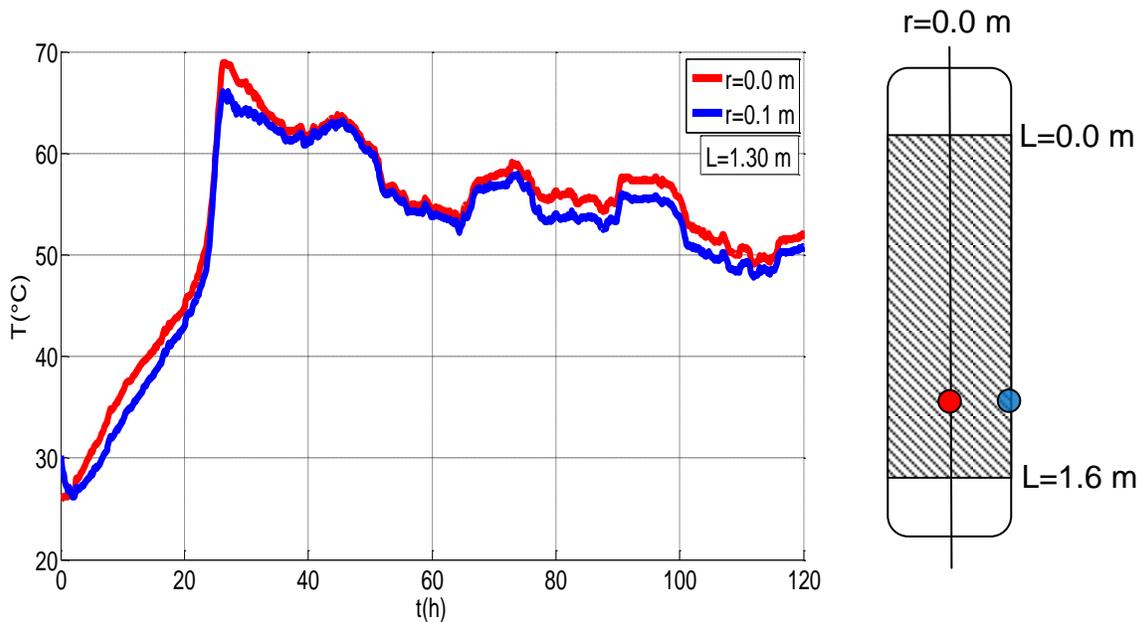


Figura 3.20. Comparación radial de temperatura durante el experimento # 2.

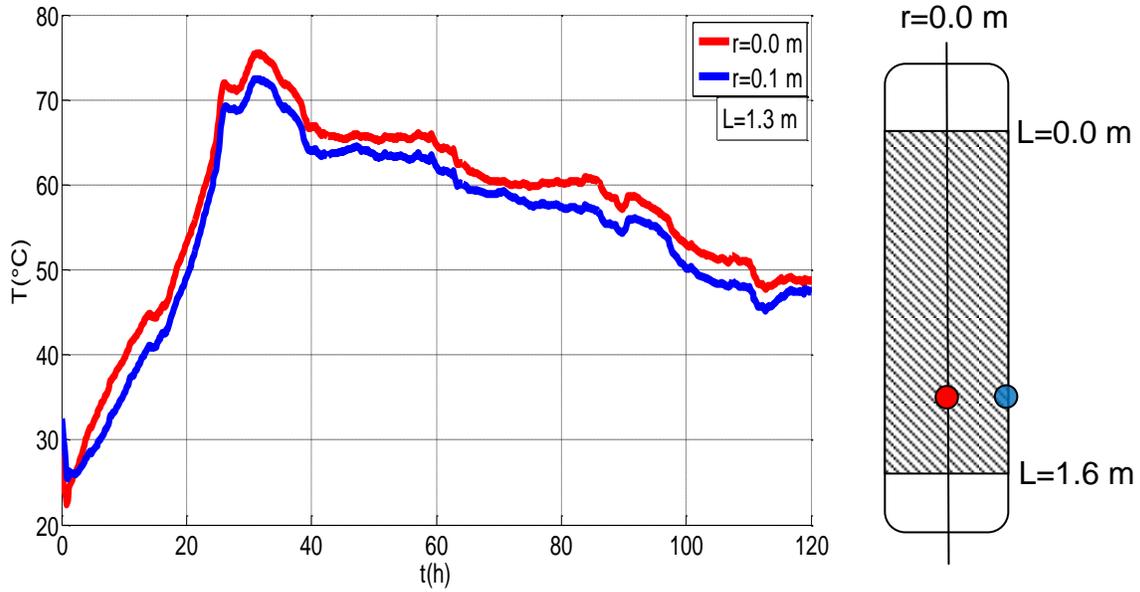


Figura 3.21. Comparación radial de temperatura durante el experimento # 3.

Una vez obtenidos los datos experimentales, se ajustaron los parámetros mediante la subrutina GREG tal como se muestra en la sección 2.6. La Tabla 3.5 indica el valor fijo de los parámetros obtenidos en el ajuste, con estos valores el modelo predice el comportamiento de la temperatura y la concentración de oxígeno para diferentes condiciones de operación en el reactor.

Tabla 3.5. Parámetros obtenidos del ajuste

Parámetro	Valor fijo
E_a (kcal/kg)	11.5
Y_{O_2} (kgO ₂ /kg SVB)	0.3
D_{effz} (m ² /s)	2.50×10^{-6}
\bar{Y} (kg SSV/kg SVB)	2.24
μ (1/s)	8.56×10^{-5}
μ_b (1/s)	10.5×10^{-5}
E_{a2} (kcal/kg)	3.0×10^{-1}
λ_{effz} (kcal/m·s·°K)	3.60×10^{-5}
λ_{effr} (kcal/m·s·°K)	3.60×10^{-5}

Los datos experimentales son descritos por el modelo de forma muy adecuada, como se ve en las Figuras 3.22-3.27. Es importante remarcar que el ajuste de parámetros es multivariable, es decir el modelo logra ajustar no solo la temperatura experimental sino además al consumo de oxígeno, de manera simultánea, con coeficientes de correlación mayores a 0.8.

En las Figuras 3.22-3.24 se puede observar que la concentración del oxígeno decrece debido al consumo celular, sin embargo es importante observar que no es el mismo comportamiento que describen las ecuaciones de diseño ya que éstas predicen un decaimiento en la concentración de oxígeno muy pronunciado (Figura 3.3) lo cual no sucede experimentalmente el modelo logra describir esta parte, correspondiente a la fase termofílica, de manera muy precisa. Posteriormente después de las treinta horas se logra observar una disminución en el consumo de oxígeno, debido a la muerte celular, lo cual es descrito también por las ecuaciones de diseño, pero a partir de la hora 50 vuelve a existir un consumo de oxígeno debido a que la temperatura disminuye y existe una reactivación de los microorganismos. Esto último no es considerado en las ecuaciones de diseño las cuales no lograrían describir este comportamiento, sin embargo el modelo propuesto si logra describir este aspecto. Esto es debido al término de decaimiento celular que no es considerado en ningún modelo cinético reportado previamente. Aunado a lo anterior el modelo desarrollado en este trabajo fue modificado con un "Núcleo sobreviviente" (N_s), es decir no todos los microorganismos son eliminados del sistema (Si $X=0 \rightarrow X=N_s$). Es decir, se postula que existen núcleos de microorganismos que sobreviven en el sistema y que son capaces de volver a desarrollarse nuevamente hasta que el sustrato se agote. Estos consumirán oxígeno con una velocidad menor por que el N_s es muy pequeño (1×10^{-5}) y la concentración de sustrato es menor que la inicial. El valor de N_s es una suposición establecida en el programa basada únicamente en hechos empíricos pero que logra describir de manera muy acertada la última fase experimental.

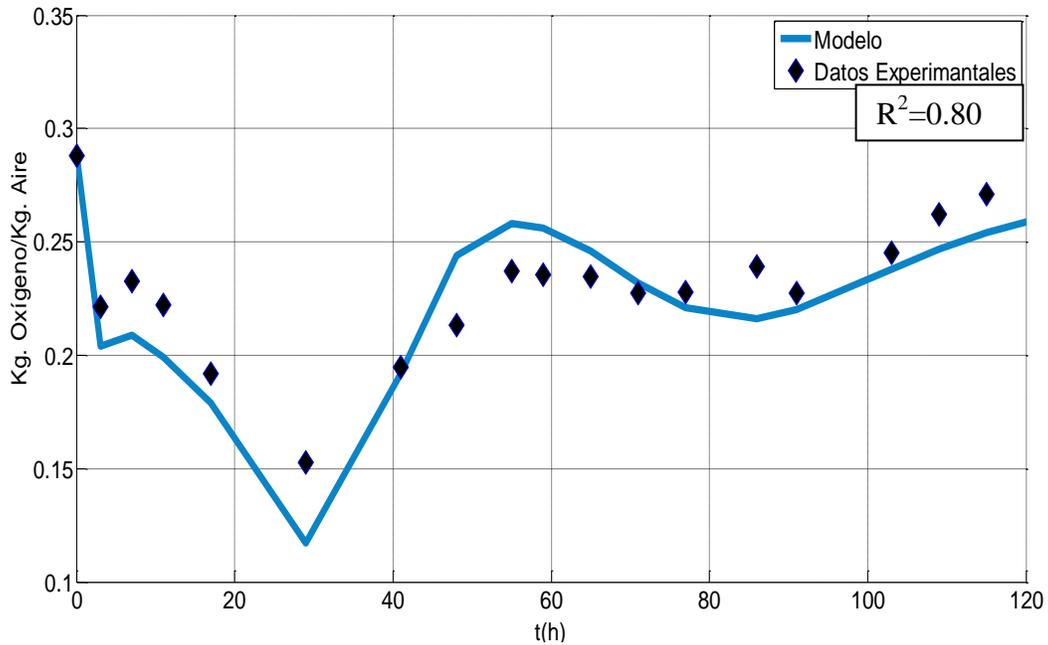


Figura 3.22. Aproximación del modelo al experimento # 1 para el contenido de oxígeno a la salida del reactor en $L=2.7$ m.

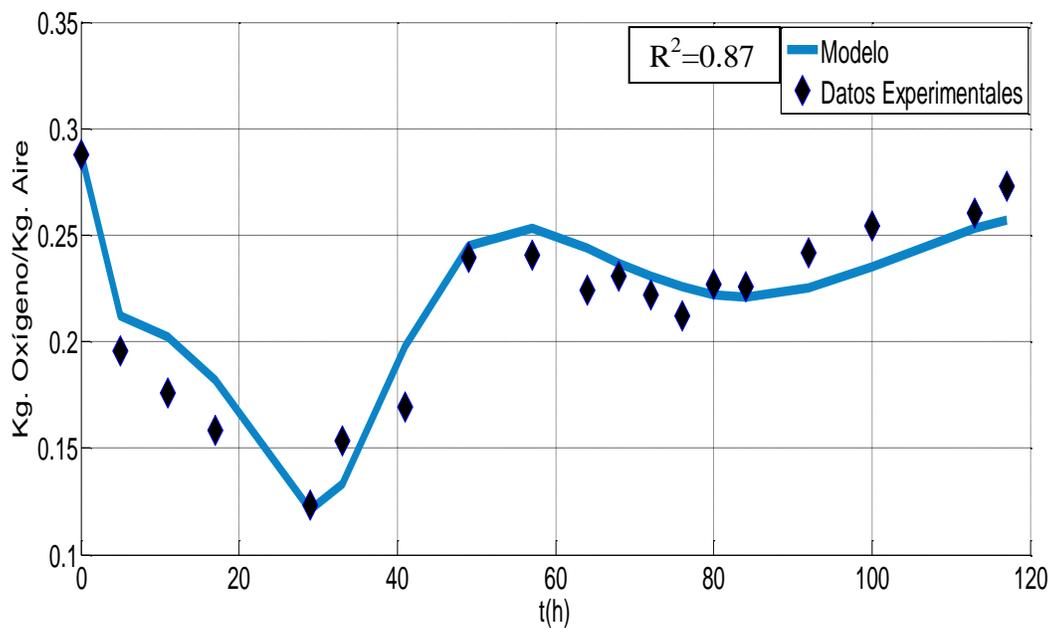


Figura 3.23. Aproximación del modelo al experimento # 2 para el contenido de oxígeno a la salida del reactor en $L=1.6$ m.

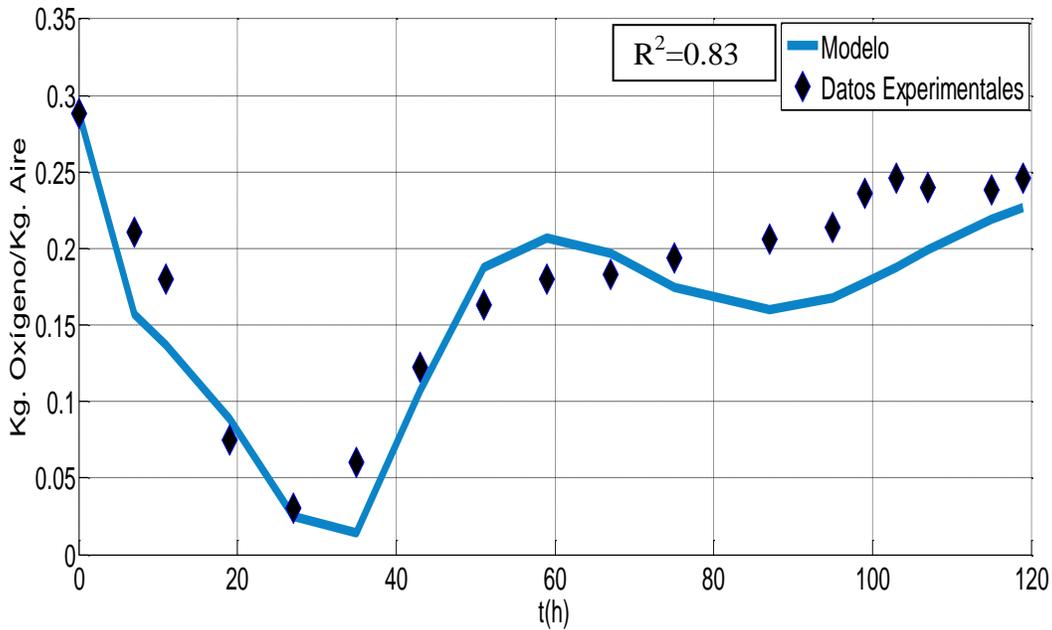


Figura 3.24. Aproximación del modelo al experimento # 3 para el contenido de oxígeno a la salida del reactor en $L=1.6$ m.

En cuanto a la temperatura, Figuras 3.25-3.27, se observó una variación mínima en los tres experimentos. El modelo logró describir adecuadamente los valores experimentales. Esta variación mínima se atribuye a que la concentración de oxígeno en el reactor siempre estuvo por arriba de cero, incluso para la velocidad de flujo de aire más baja, es decir no se alcanzaron condiciones anaerobias en el reactor. Es posible observar que ningún modelo de las ecuaciones de diseño lograría describir ambas fases (termofílica y de enfriamiento), de forma acertada, como vimos en la secciones anteriores. El modelo desarrollado en este trabajo logra describir durante cinco días ambas variables.

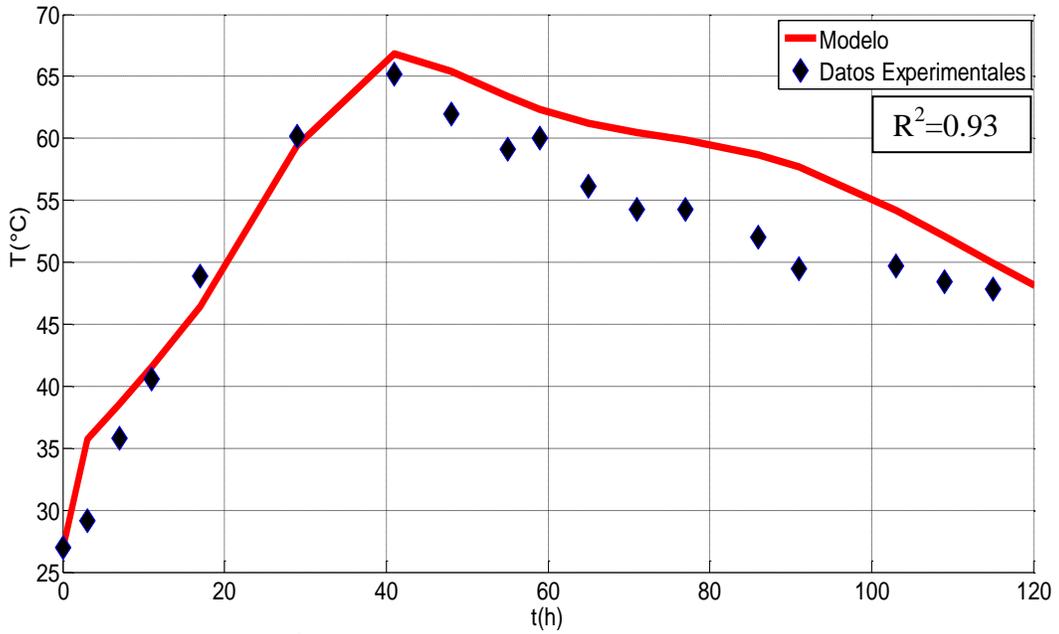


Figura 3.25. Aproximación del modelo al experimento # 1 para la temperatura del lecho en $L=0.85$ m.

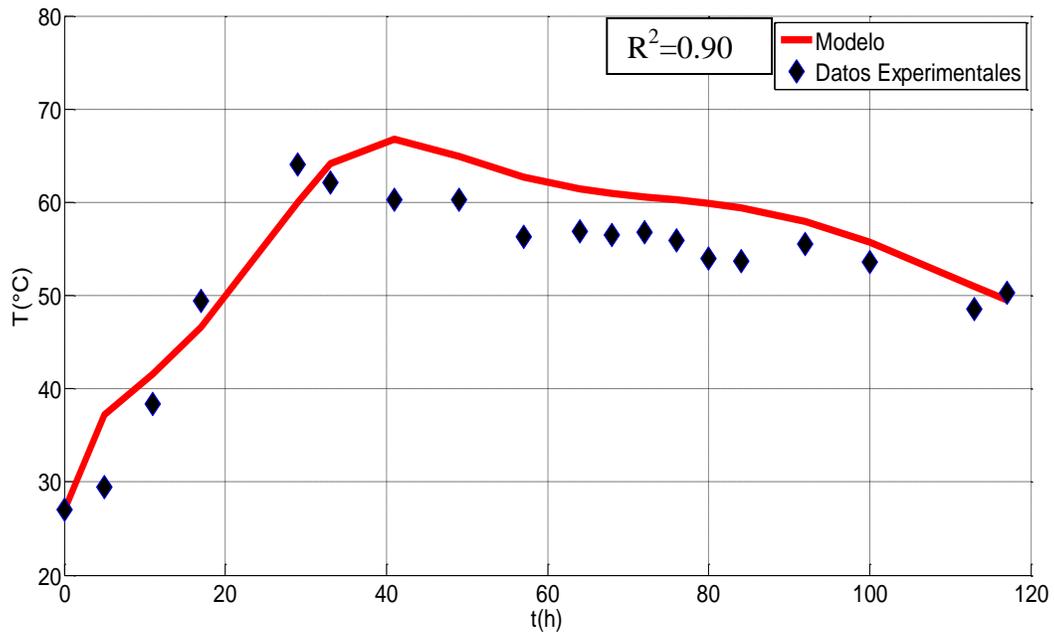


Figura 3.26. Aproximación del modelo al experimento # 2 para la temperatura del lecho en $L=1.30$ m.

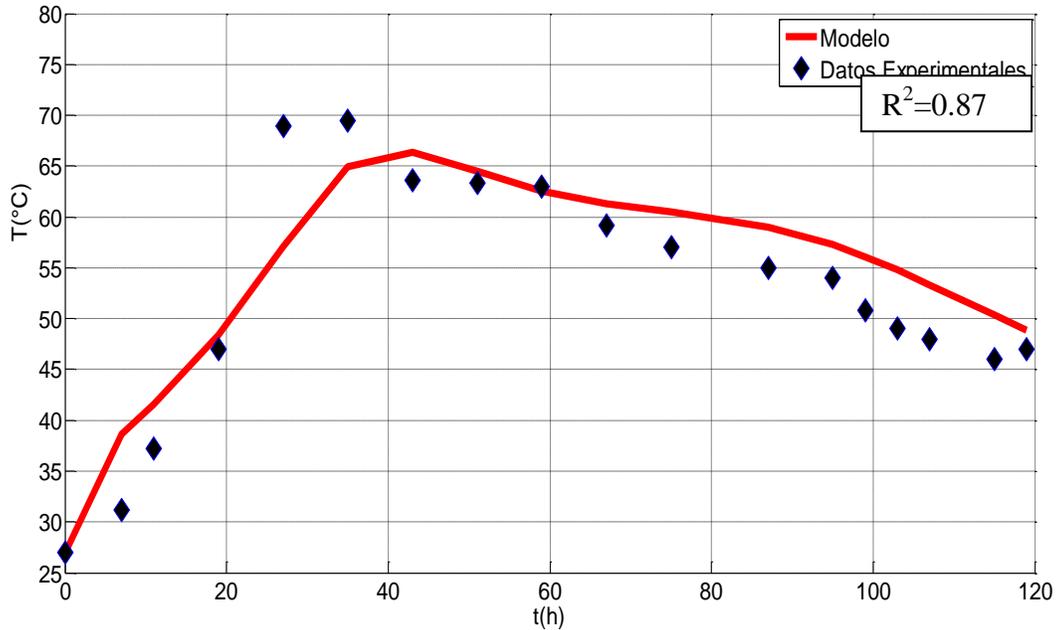


Figura 3.27. Aproximación del modelo al experimento # 3 para la temperatura del lecho en $L=1.30$ m.

La Figura 3.28 describe mediante un mapa colorimétrico las temperaturas axiales y radiales del reactor obtenidas con el modelo, las aproximaciones del modelo indican que en cualquier punto el reactor alcanza una temperatura mayor a 50°C después de las 31 horas y que en la parte central se alcanza la temperatura máxima ($T_R=70^{\circ}\text{C}$). De la misma manera el modelo indica que las zonas más frías se encuentran a las orillas de la columna dada sus cercanías con la frontera del sistema. En cuanto a las posiciones radiales (siendo 6 la orilla del reactor y 0 el centro) se observa que en todo momento la posición central se mantiene más cálida a lo largo del eje axial. Es posible predecir con esta simulación que prácticamente todo el reactor estará desinfectado después de 31 h y completamente pasteurizado después de las 115 h donde la temperatura baja gradualmente.

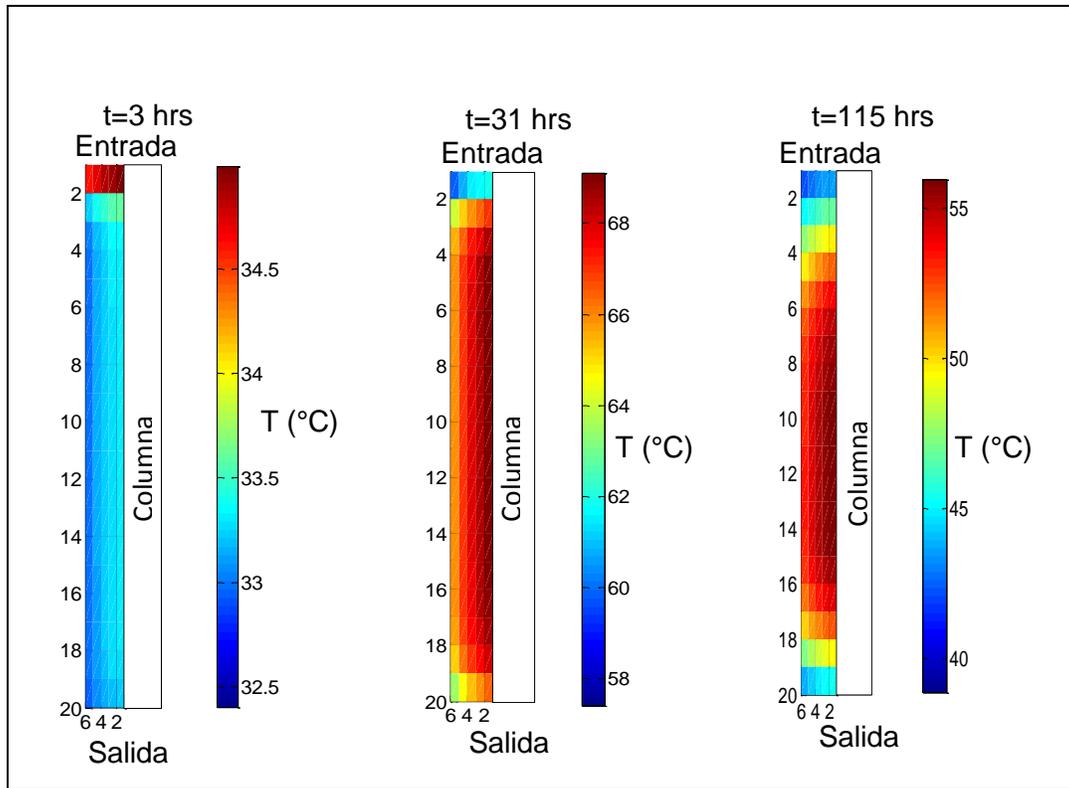


Figura 3.28. Modelación de la distribución espacial de temperatura a través de la columna del reactor

3.6. Remoción de coliformes fecales

Los resultados de la presencia de coliformes fecales en la composta durante el experimento # 2 se muestran en la Tabla 3.6. Después del proceso de compostaje, se dejó madurar el material durante un mes, después de este período se realizó una nueva determinación de coliformes con la finalidad de verificar un posible recrecimiento.

El recrecimiento de coliformes disminuye debido a que las condiciones térmicas dentro del reactor son más homogéneas en comparación con una pila de composta, en donde existen paquetes (pockets) de calor. Es decir una pila de composta no se calienta de manera homogénea sino en secciones, lo cual no permite un calentamiento uniforme. Esto no ocurre en un reactor tubular ya que radialmente la temperatura tiende a ser homogénea y mayor a 50°C durante los

primeros cinco días, esta situación garantiza una pasteurización completa del material. Según los resultados obtenidos, 30 días después la composta no presentó recrecimiento de microorganismos.

Tabla 3.6. Presencia de coliformes en la composta.

Tiempo (d)	Coliformes fecales (NMP/g)
1	43000
2	0.0
3	0.0
4	0.0
11	<3
30	75

4. Conclusiones

- Se construyó un reactor tubular mediante el modelo de tanque agitado, el cual funcionó adecuadamente debido a que:
 - 1) El flujo de aire fue bajo.
 - 2) La relación L/D fue maximizada.

- Se pudo diseñar un reactor de compostaje que operó con una masa de 35 kg que logró autocalentarse, lo cual no ha sido reportado en la literatura.

- Introducir aire seco en un reactor de compostaje con una carga orgánica tan pequeña, como la usada en este trabajo, induce a la evaporación del agua al interior del reactor. Esto provoca una pérdida de calor latente con su consecuente enfriamiento lo cual es fatal para su funcionamiento.

- El reactor diseñado para la desinfección de los biosólidos disminuyó la cantidad de coliformes fecales y eliminó cierta cantidad de los SV (20%). Por lo tanto, no se recomienda utilizar el reactor hasta la fase de maduración (formación de húmus).

- El MDF-RK4 resultó ser un método de mediana complejidad con el que se resolvió el problema planteado por el sistema de EDP del modelo MTT empleando pocas iteraciones.

- El modelo desarrollado MTT, aunque es más elaborado y complicado permitió describir los gradientes tanto radiales como axiales de temperatura.

- La cinética de Contois, modificada en este trabajo con la adición de un término relacionado con el decaimiento celular, permitió describir de manera adecuada el comportamiento de la temperatura y la concentración

de oxígeno al mismo tiempo. Ningún trabajo encontrado en la literatura reporta un ajuste simultáneo con ambas variables.

- Se logró encontrar los parámetros del MTT que permiten describir los datos experimentales.
- El modelo mostró robustez al probarse bajo diferentes condiciones de operación y diseño del reactor.

Perspectivas

Con la aplicación del modelo desarrollado en este trabajo se pueden establecer condiciones de operación para un óptimo rendimiento del reactor en cuanto a remoción de coliformes fecales.

La aplicación del modelo desarrollado en este trabajo, permitirá establecer condiciones de operación del proceso de compostaje que permitan una higienización óptima de otros materiales, tales como desechos agropecuarios que se pretendan reutilizar. Para llevar a cabo lo anterior será necesario desarrollar nuevos experimentos, empleando los materiales que se deseen higienizar y modificando la velocidad y la temperatura en el aire saturado a la entrada del reactor.

El modelo desarrollado puede disminuir las suposiciones y simplificaciones hechas. Esto llevaría a plantear un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) más complejo que podría representar otros aspectos fundamentales del proceso, como el cambio de densidad o el cambio de humedad.

Se recomienda utilizar el modelo MTT para la implementación de la automatización y control del proceso de compostaje.

Una de las desventajas que presenta el compostaje a gran escala (pilas de composta) para la estabilización de biosólidos, es que el material abultante puede estar disponible en cantidades limitantes. El modelo desarrollado en este trabajo

puede emplearse para investigar la viabilidad de usar diversos materiales que permitan desarrollar un proceso de compostaje adecuado.

Referencias

Ahn, H. K., Sauer, T. J., Richard, T. L. & T. D. Glanville, Determination of thermal properties of composting bulking materials. *Bioresource Technology*. 100 (2009) 3974-3981.

Alatríste Mondragón, F., Vidriales, G. & Moreno, L. Reporte Técnico FOMIX-SLP (Proyecto 156188). Estudio de la producción a nivel planta piloto de composta a partir de biosólidos y materiales lignocelulósicos y su uso agroindustrial como una alternativa para el problema de confinamiento bajo la Norma NOM-004-SEMARNAT. PROAGUA-IPICYT

Brandon, J. R. & Neuhausr, K. S. Moisture effects on invation and growth of bacterial and fungi in sludges. *Sandia Laboratories*. NM. 78(1978) 1304.

Bruce, A. M., Pike, E. B. & Fisher, W. J. A rewev of treatment options to meet the EC sludge directive. *J. Inst. Water Environ Manage*. 1 (1990) 4.

Chad, W., Higgins, P. & Walker, P. Validation a new model for aerobic solids decomposition: simulations with substrate specific kinetics, *Process Biochemistry*, 36 (2001) 875-884.

Delgado, J. A critical review of dispersion in packed beds. *Heat and Mass Transfer*. 42 (2006) 279-310.

Dégremont. Manual técnico del agua. Bilbao, (1980) 105-473, 749-781.

Figeroa, U. Uso de biosólidos en suelos agrícolas. Foro estatal de ciencia y tecnología. Coahuila, (2003).

Gómez Tovar, F. Estudios en laboratorio para la evaluación de la factibilidad técnica del proceso de composteo de biosólidos y residuos lignocelulósicos. Instituto Tecnológico de Celaya, departamento de ingeniería bioquímica. (2007) 66.

Greenberg, D. Advanced Engineering Mathematics. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, (1988).

Haug, T. R. The Practical Handbook of Compost Engineering. Lewis Publishers: Boca Raton. (1993) 395-399.

Jimenez, B., Barrios, J. A. & Maya, C. Class B biosolids production from wastewater sludge with high pathogenic content generated in an advanced primary treatment. Water Science and Technology, 42 (2000) 103-110.

Johnke, B. Emissions from Waste Incineration, in: Good Practice Guidance and Uncertainty Management in National Greenhouse Gas Inventories, Institute for Global Environmental Strategies, (2003).

Kruse, C. W. Sludge disinfection in evaluation of current developments in municipal waste treatment. Technology Information Center. Energy and development administration (1977).

Linelle, T. F., Stéphane, C. C. & Walker, L. P. Integral mixed microbial population dynamics into modeling energy transport during the initial stages of aerobic composting. Bioresource Technology, 102 (2011) 5162-5168.

Mason, I. G. Mathematical modeling of the composting process: A review. Waste Management, 26 (2006) 3-21.

Metcalf & Eddy. Wastwater Engeniering: treatment and reuse. Civil and environmental engeniering. McGraw Hill, 4 (2003) 1457-1622.

Moheel, R., White, R. & Das, K.C. Simulation Model for Composting Cellulosic (Bagasse) Substrates. Compost science and utilization, (1998) 82-86.

Nakasaki, K., Shoda, M & Kubota, H. Effect of temperature on composting of sewage sludge, Applied and environmental microbiology, 50 (6) (1985) 1526-1530.

Nakayama, A., Nakasaki, K., Kuwahara, F. & Sano, Y. A Lumped Parameter Heat Transfer Analysis for Composting Processes with Aeration. Heat and mass transfer, 129 (2007) 902-906.

Nattakorn, B & Tetsuya, I. A new analytical approach to optimizing the design of large-scale composting systems, Bioresource Technology, 99 (2008) 1630–1641.

Ochoa, J. A. Metodos matemáticos aplicados a la ingeniería química. Departamento de ingeniería de procesos e hidráulica, UAM-Iztapalapa (2005) 405.

Oropeza, N. Lodos residuales: estabilización y manejo. Caos Conciencia, 1 (2006) 51-58.

Petric, I. & Selimbasic, V. Composting of poultry manure and wheat straw in a closed reactor: optimum mixture ratio and evolution of parameters, Biodegradation 19 (2008) 53–63.

Ratkowsky, D. A., Lowry, R. K., McMeekin, T. A & Stokes, A. N., Chandler, R. E. Model for bacterial culture growth rate throughout the entire biokinetic temperature range. J. Bacteriol. 154 (1983) 1222-1226.

Richard, T. L. The Kinetics of Solid-State Aerobic Biodegradation. Ph.D. Thesis, Cornell University, Ithaca, NY, (1997) 338.

NOM-004-SEMARNAT-2002. Protección al ambiente, lodos y biosólidos especificaciones y límites máximos permisibles de contaminantes para su aprovechamiento y disposición final.

Spoehr, H. A. & **Milner**, H. W. The chemical composition of chlorella; Effect of environmental conditions. 24 (1949) 120.

Van Ginkel, J. T., Raats, P. A. C. & Van Haneghem. Bulk density and porosity distributions in a compost pile. Netherlands Journal of Agricultural Science. 47 (1999) 105-121.

Ward, R. L. & Brandon, J. R. Effect of heat on pathogenic organism found in wastewater sludge. Composting of municipal residues and sludges. Proceeding of the 1977 national conference, Rockville, MD: Information transfer. (1977).

Zambra, C. C., Moraga, N. O. & Escudey, M. Heat and mass transfer in unsaturated porous media: Moisture effects in compost piles self-heating. Heat and mass transfer. 53 (2011) 2801-2810.

Zili, L. & Nasrallah, B. Heat and mass transfer during drying in cylindrical packed beds. Numerical heat transfer, part A, Applications, An International Journal of Computation and Methodology. 32:2 (1999) 201-228.

Apéndices

Apéndice 1.1: k_d para diferentes materiales, con sus respectivas fracciones de biodegradación a una temperatura de 25°C (Haug, 1993).

Tabla 1.1.A. k_d para diferentes materiales

Substrate	k_d (d ⁻¹)		Percent	
	Fast	Slow	Fast	Slow
Digested sludge				
(Average) ^a	0.282	0.0037	34	66
(Standard desviation)	0.0169	0.0029	12	12
Limed Raw Sludge				
(Average) ^b	0.293	0.0045	32	68
(Standard desviation)	0.0164	0.0075	10	10
Primary papermill sludge				
(Average) ^c		0.0033	0	100
(Standard desviation)		0.0006		
Primary papermill sludge	0.0333	0.006	26	74
Kraft papermill sludge				
(Average) ^d		0.0015	0	100
(Standard desviation)		0.0002		
Sawdust	0.01	0.0016	20	80
Crude oil	0.017	0.011	35	65
Wheat satraw		0.0029	0	100
Wood bark		0.0004	0	100
Bermuda grass	0.0383	0.0132	40	60
Rye grass	0.0699	0.0172	28	72

a Promedio de 31 a 60 días de composteo colectadas del mismo establecimiento.

b Promedio de 17 a 60 días de composteo colectadas del mismo establecimiento.

c Promedio de cuatro muestras.

d Promedio de cuatro muestras.

Apéndice 1.2: Clasificación de los biosólidos según la NOM-004

Clase A. Estos lodos se denominan como excelentes, y su aplicación no se restringe a su aplicación agraria y su uso urbano. Durante su aplicación estos pueden estar en contacto directo con el público.

Clase B. La calidad de estos se denomina como excelente o buena, su uso urbano no está restringido, pero a diferencia de los biosólidos clase A, durante su aplicación no se permite el contacto al público.

Clase C. Se denominan como bueno, no obstante su uso urbano está restringido. Solo podrán ser utilizados para plantaciones forestales, mejoramiento de suelos y producción de forrajes.

Tabla 1.2.A. Límites máximos permisibles para patógenos, parásitos en biosólidos.

Clase	Indicador bacteriológico de contaminación	Patógenos	Parásitos
	Coliformes fecales NMP/g en base seca	Salmonella s.p.p. NMP/g en base seca	Huevos de helminto/g en base seca
A	< 1000	< 3	<1
B	< 1000	< 3	<10
C	< 2000000	< 300	<35

(NOM-004-SEMARNAT-2002)

Apéndice 1.3: Distribución de los niveles de patógenos y parásitos (Alatriste et al., 2011)

Tabla 1.3.A. Reducción de coliformes en una pila de composta

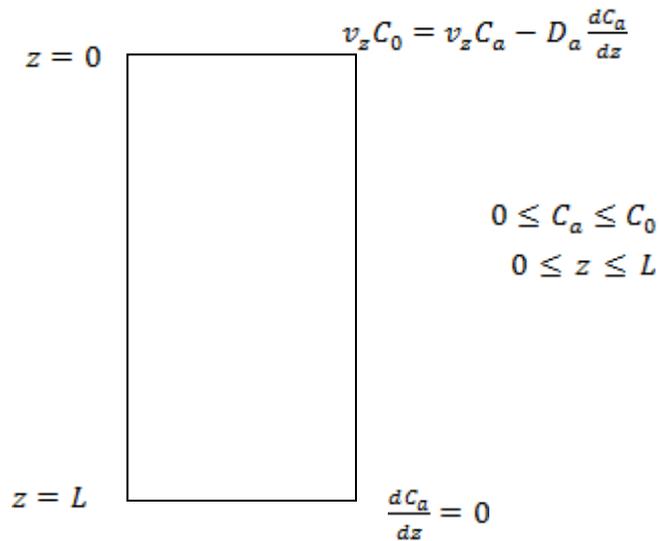
Pila	Punto de muestreo		Indicadores de patógenos		
	Altura en la pila	Posición radial en la pila	Coliformes NMP/g ST	Salmonella NMP/g ST	Huevos de Helminto Viables
1	superior	interna ^a	240	<3	<1
	superior	externa ^b	240	<3	<1
	central	interna	<3	<3	<1
	central	externa	<3	<3	<1
	inferior	interna	3.6	<3	<1
	inferior	externa	9.1	<3	<1
	junto al difusor	interna	<3	<3	<1
	junto al difusor	externa	43	<3	<1
2	superior	interna	9.1	<3	<1
	superior	externa	3	<3	<1
	central	interna	150	<3	<1
	central	externa	93	<3	<1
	inferior	interna	23	<3	<1
	inferior	externa	9300	<3	<1
3	superior	interna	9.1	<3	<1
	superior	externa	15	<3	<1
	central	interna	39	<3	<1
	central	externa	9.1	<3	<1
	inferior	interna	93	<3	<1
	inferior	externa	<3	<3	<1
4	superior	interna	7.2	<3	<1
	superior	externa	930	<3	<1
	central	interna	93	<3	<1
	central	externa	150	<3	<1
	inferior	interna	43	<3	<1
	inferior	externa	23	<3	<1

Apéndice 2.1. Solución del modelo de dispersión en estado estacionario

El siguiente modelo considera la transferencia de masa por convección y dispersión en z con reacción (r).

$$v_z \frac{dC_a}{dz} - D_a \frac{d^2C_a}{dz^2} = r \quad \therefore \quad r = -kC_a$$

Este modelo está sujeto a las siguientes condiciones de frontera.



$z = 0$ $v_z C_0 = v_z C_a - D_a \frac{dC_a}{dz}$
 $z = L$ $\frac{dC_a}{dz} = 0$

$0 \leq C_a \leq C_0$
 $0 \leq z \leq L$

A continuación se introdujeron las siguientes coordenadas adimensionales.

$$\begin{aligned}
 0 \leq \varepsilon \leq 1 & \quad \varepsilon = \frac{z}{L} \\
 0 \leq C^* \leq 1 & \quad C^* = \frac{C_a}{C_0}
 \end{aligned}$$

De tal manera que el modelo de dispersión en términos adimensionales queda de la siguiente manera.

$\varepsilon = 0$ $C_0 = C^* - \frac{dC^*}{d\varepsilon}$
 $\frac{1}{Pe} \frac{d^2 C^*}{d\varepsilon^2} - \frac{dC^*}{d\varepsilon} = \beta$
 $Pe = \frac{v_z L}{D_a}$
 $\beta = -k\bar{t}C^*$
 $\varepsilon = 1$ $\frac{dC^*}{d\varepsilon} = 0$

Al resolverse es posible llegar a la siguiente expresión.

$$\frac{C_a}{C_0} = A e^{m_1 \varepsilon} + B e^{m_2 \varepsilon}$$

Cuando $D_a \rightarrow 0$ la solución exacta toma la siguiente forma, con la cual se puede describir el comportamiento de un PFR.

$$\frac{C_a}{C_0} = e^{-k\bar{t}}$$

Pero cuando $D_a \rightarrow \infty$ la expresión que se obtiene describe el comportamiento de un CSTR

$$\frac{C_a}{C_0} = \frac{1}{1 + k\bar{t}}$$

Apéndice 2.2. Parámetros de entrada para los modelos CSTR

Tabla 2.2.A. Entradas del modelo CSTR

Símbolo	Descripción	Valor	Bibliografía
C_a	Calor específico del aire seco (kJ/kg °K)	1.0132	Condición estándar
C_s	Calor específico del material sólido (kJ/kg °K)	1.8	Condición estándar
C_v	Calor específico del vapor de agua (kJ/kg °K)	1.8673	Condición estándar
β_r	Coefficiente estequiométrico de respiración (gr O ₂ /gr CO ₂)	1	(Chad et al., 2001)
k_T	Coefficiente de transferencia de calor (1/h)	0.0426	Experimental
K_c	Constante de crecimiento para una cinética de Contois	24	(Nakayama et al., 2007)
R_A	Constante de los gases ideales (J/mol °K)	8.314	(Nakayama et al., 2007)
W_a	Contenido de humedad a temperatura ambiente (% w.b.)	0.15	(Nakayama et al., 2007)
W_2	Contenido de humedad final (% w.b.)	0.8	(Nakayama et al., 2007)
$\rho_a(T)$	Densidad del aire dependiente de la temperatura en el reactor	variable	Correlación
ρ_{db}	Densidad de la base seca (kg/l)	0.411	Experimental
E_A	Energía de activación (J/mol)	29000	(Nakayama et al., 2007)
H_{rx}	Entalpía de reacción (kJ/kg SSV)	2750	Experimental
h_v	Entalpía de vaporización (kJ/kg)	2250	(Boock)
G_{a1}	Flujo de aire a la entrada (m/s)	1	Experimental

G_{a2}	Flujo de aire a la salida (m/s)	0.1-0.5	Experimental
$H_s(T)$	Humedad de saturación a la temperatura del reactor (kg H ₂ O/kg aire seco)	variable	Correlación
$H_s(T_a)$	Humedad de saturación a la temperatura ambiente (kg H ₂ O/kg aire seco)	0.023	Condición estándar
m_c	masa de composta (kg)	56	Experimental
ϵ	Porosidad	0.6	Experimental
y	Rendimiento para el crecimiento (kg SSV/kg SVB)	0.5	(Chad et al., 2001)
y_{O_2}	Tasa específica para el consumo de oxígeno (kg O ₂ /g SVB)	1.5	(Chad et al., 2001)
R_{CO_2slow}	Tasa lenta de producción de dióxido de carbono asociada a una lenta degradación (g CO ₂ /kg SV.d)	22	(Richard ,1997)
$(R_{CO_2opt})_{max}$	Tasa máxima producción de dióxido de carbono asociada a una rápida degradación (g CO ₂ /kg SV.d)	178	(Richard ,1997)
T_{max}	Temperatura máxima (°C)	71.6	(Ratkowsky et al., 1983)
T_L	Temperatura media (°C)	60	(Ratkowsky et al., 1983)
T_{min}	Temperatura mínima (°C)	58.6	(Ratkowsky et al., 1983)
T_{opt}	Temperatura optima (°C)	5	(Ratkowsky et al., 1983)
V_r	Volumen del reactor (l)	136	Experimental
W_{db}	Contenido de humedad en la base seca (% w.b.)	0.6	Experimental
$\langle W \rangle^s$	Humedad contenida en el sólido (kg H ₂ O/kg solido)	variable	(Nakayama et al., 2007)
X_{O_2}	Fracción de oxígeno en	0.288	Experimental

	la entrada		
X_{O_2exit}	Fracción de oxígeno a la salida	variable	Experimental
A	Área de transferencia de calor (m^2)	$2\pi L$	Experimental
SVB	Sólidos volátiles biodegradables (kg SVB)	variable	Modelo cinético (Chad et al., 2001)
FAS	Espacios libres de aire	variable	(,1980)
h	Coeficiente de transferencia convectiva ($kJ/m^2.h$)	0.13	Experimental
k	Conductividad térmica ($kcal/s.m.^{\circ}K$)	3.34×10^{-5}	Experimental
SMOUT	Contenido de humedad en el sólido ($kg H_2O/kg$ Sólido)	variable	(Haug ,1980)
T_a	Temperatura ambiente ($^{\circ}C$)	25	Condición estándar
U	Coeficiente global de transferencia de calor ($kJ/h.m^2$)	2.48	Experimental
VOLPO2	Volumen de oxígeno presente en el gas de salida (l)	variable	(Haug ,1980)
τ	Tiempo de la fase lag (1/d)	6	(Richard ,1997)

Apéndice 2.3. Entradas del modelo

Tabla 2.3.A. Entradas del modelo (ecuaciones de transferencia)

Parámetros	Valor	Determinación
K_c Constante media de saturación	24	(Nakayama et al., 2007)
T_0 Temperatura del aire a la entrada del reactor (°C)	40	Experimental
T_{amb} Temperatura ambiente (°C)	25	Condición estándar
T_m Temperatura media (°C)	60	(Nakayama et al., 2007) (Nakasaki et al., 1985)
T_h Temperatura máxima (°C)	80	(Nakasaki et al., 1985)
R_a Constante de los gases ideales (kcal/mol°C)	1.985×10^{-3}	(Nakayama et al., 2007)
H_{rx} Entalpía de reacción (kcal/kg SSV)	2780.0	Experimental
k_{eff} Coeficiente conductivo del sólido compuesto (kcal/s.m.°K)	3.34×10^{-5}	Experimental
h Coeficiente convectivo del aire (kcal/m ² .s.°K)	1.2×10^{-3}	(Nakayama et al., 2007)
C_{p_L} Capacidad calorífica del material abultante (kcal/kg.°C)	0.42	(Ahn et al., 2009)
C_{p_w} Capacidad calorífica del agua (kcal/kg.°C)	1	Condición estándar
$C_{p_{DS}}$ Capacidad calorífica del sólido seco (kcal/kg.°C)	0.243	(Ahn et al., 2009)
C_{p_G} Capacidad calorífica del pasto (kcal/kg.°C)	0.365	(Ahn et al., 2009)
C_{p_a} Capacidad calorífica del aire (kcal/kg.°C)	0.23	(Ahn et al., 2009)

f_a	Fracción volumétrica del aire	0.419	Experimental
f_w	Fracción volumétrica de agua	0.2	Experimental
f_{DS}	Fracción volumétrica de sólido seco	0.033	Experimental
f_G	Fracción volumétrica de pasto	0.031	Experimental
f_L	Fracción volumétrica material abultante	0.317	Experimental
ρ_w	Densidad del agua (kg/m ³)	1000	Condición estándar
ρ_{ap}	Densidad aparente (kg/m ³)	416.63	Experimental
ρ_{DS}	Densidad del sólido seco (kg/m ³)	847.2	(Ahn et al., 2009)
ρ_G	Densidad del pasto (kg/m ³)	216	(Ahn et al., 2009)
ρ_L	Densidad del material abultante (kg/m ³)	150	(Ahn et al., 2009)
L/D	Relación longitud-diámetro	8	Experimental
$C_{O_2}^\circ$	Concentración inicial de oxígeno (kg O ₂ /kg aire)	0.288	Experimental
U	Coefficiente global de transferencia de calor (kcal/s.m ²)	9.98×10^{-5}	Experimental

Apéndice 2.4. Desratización del modelo

Método explícito de diferencias finitas de 1° orden (MDF).

Fase compuesta (sólido-líquido)

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_{effs} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right] - \frac{H_{rx}}{\langle \rho C_p \rangle^s} \left(\frac{dS}{dt} \right) + \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} (T_a - T_s)$$

Ecuación de recurrencia

$$T_{i,j}^{k+1} = \frac{\psi}{(j-1)\Delta r} [T_{i,j+1}^k - T_{i,j}^k] + \frac{\psi}{\Delta r} [T_{i,j+1}^k - 2 \cdot T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k] + \frac{\psi}{\Delta r} [T_{i+1,j}^k - 2 \cdot T_{i,j}^k + T_{i-1,j}^k] \\ + \varphi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \chi (T_a - T_s) + T_{i,j}^k$$

Donde

$$\varphi = \frac{H_{rx} \Delta t}{\langle \rho C_p \rangle^s} \quad \chi = \frac{H \Delta t}{\langle \rho C_p \rangle^s} \quad \psi = \frac{\alpha_{eff} \Delta t}{L^2 \Delta r} \quad \alpha_{eff} = \frac{K_{eff}}{\langle \rho C_p \rangle^s}$$

Fase gaseosa

$$\frac{\partial T_a}{\partial t} = -v_{int} \frac{\partial T_a}{\partial z} + \alpha_{effz} \frac{\partial^2 T_a}{\partial z^2} + \alpha_{effr} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_a}{\partial r} \right) + \frac{H}{f_a \rho_a C_{p_a}} (T_s - T_a)$$

Ecuación de recurrencia

$$T_{i,j}^{k+1} = \beta [T_{i+1,j}^k - T_{i,j}^k] + \alpha_1 [T_{i+1,j}^k - 2 \cdot T_{i,j}^k + T_{i-1,j}^k] + \frac{\alpha_2}{(j-1)} [T_{i,j+1}^k - T_{i,j}^k] \\ + \alpha_2 [T_{i,j+1}^k - 2 \cdot T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k] + \omega [T_s - T_a] + T_{i,j}^k$$

Donde

$$\beta = \frac{v_{int} \Delta t}{L \Delta r} \quad \alpha_1 = \frac{\alpha_{effz} \Delta t}{(L \Delta r)^2} \quad \alpha_2 = \frac{\alpha_{effr} \Delta t}{(L \Delta r)^2} \quad \omega = \frac{H \Delta t}{f_g \rho_a C_{p_a}}$$

Oxígeno

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_{int} \frac{\partial C}{\partial z} + D_{effL} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a} \left(\frac{dS}{dt} \right)$$

Ecuación de recurrencia

$$C_{i,j}^{k+1} = \eta [C_{i+1,j}^k - C_{i,j}^k] + \varepsilon [C_{i+1,j}^k - 2 \cdot C_{i,j}^k + C_{i-1,j}^k] + \xi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + C_{i,j}^k$$

Donde

$$\eta = v_{\text{int}} \Delta t \quad \varepsilon = D_{\text{eff}} L \Delta t \quad \xi = \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a}$$

Biomasa sustrato

$$\frac{CX_{i,j}^{k+1} - CX_{i,j}^k}{\Delta t} = -Y \frac{CS_{i,j}^{k+1} - CS_{i,j}^k}{\Delta t} = \mu(T_s) \frac{S_{i,j}^k \cdot X_{i,j}^k}{K_c \cdot X_{i,j}^k + S_{i,j}^k} \cdot \frac{C_{i,j}^k}{K_{O_2} + C_{i,j}^k} - b \cdot X_{i,j}^k = \gamma_s$$

Condiciones de frontera

$$j = 1; z = 1$$

$$T_{i,j}^k = T_0$$

$$j = 1; z = 1$$

$$T_{i,j}^k = T_0$$

$$i = 0; z = 0$$

$$C = 1$$

$$i = 1; r = 0$$

$$T_{j-1,i} = T_{j+1,i}$$

$$i = 1; r = 0$$

$$T_{j-1,i} = T_{j+1,i}$$

$$i = n+1; z = 1$$

$$C_{n+1,j} = C_{n-1}$$

$$i = m; r = R$$

$$T_{i,m}^k = \frac{T_{i,j-1}^k}{(1 - \Delta r Nu_{sr})}$$

$$i = m; r = R$$

$$T_{i,m}^k = \frac{T_{i,j-1}^k}{(1 - \Delta r Nu_{ar})}$$

$$j = n; Z = 1$$

$$T_{n,j}^k = \frac{T_{i-1,j}^k}{(1 - \Delta z Nu_{sz})}$$

$$j = n; Z = 1$$

$$T_{n,j}^k = \frac{T_{i-1,j}^k}{(1 - \Delta z Nu_{az})}$$

$$Nu_{sz} = \frac{hL}{k_{\text{eff}}} \quad Nu_{sr} = \frac{U(L/16)}{k_{\text{eff}}} \quad Nu_{az} = \frac{hL}{\lambda_{\text{eff}z}} \quad Nu_{ar} = \frac{U(L/16)}{\lambda_{\text{eff}r}}$$

Método de diferencias finitas acoplado al método de Runge-Kutta (MDF-RK4)
Discretización para la fase sólido-líquido

$$\langle \rho C_p \rangle^s \frac{\partial T_s}{\partial t} = k_{effs} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right] - H_{rx} \left(\frac{dS}{dt} \right) + H(T_a - T_s)$$

or

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_{effs} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \right] - \frac{H_{rx}}{\langle \rho C_p \rangle^s} \left(\frac{dS}{dt} \right) + \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} (T_a - T_s)$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \frac{\alpha_{effs}}{\Delta z^2 L^2} \cdot [T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}] + \frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2} [T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}] + \frac{\alpha_{effs}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} [T_{i,j+1} - T_{i,j-1}] - \frac{H_{rx}}{\langle \rho C_p \rangle^s (T_0 - T_{amb})} \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} (T_{i,j}^a - T_{i,j})$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \left[-2 \frac{\alpha_{effs}}{\Delta z^2 L^2} \cdot -2 \frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} \right] \cdot T_{i,j} + \frac{\alpha_{effs}}{\Delta z^2 L^2} [T_{i+1,j} + T_{i-1,j}] + \left[\frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2} + \frac{\alpha_{effs}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} \right] \cdot T_{i,j+1} \left[\frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{\alpha_{effs}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} \right] \cdot T_{i,j-1} - \frac{H_{rx}}{\langle \rho C_p \rangle^s (T_0 - T_{amb})} \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} \cdot T_{i,j}^a$$

$$A = \left[-2 \frac{\alpha_{effs}}{\Delta z^2 L^2} \cdot -2 \frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s} \right]$$

$$B = \frac{\alpha_{effs}}{\Delta z^2 L^2}$$

$$X = \frac{\alpha_{effs}}{\Delta r^2 L^2}$$

$$E = \frac{\alpha_{effs}}{2 \cdot \Delta r^2 L^2}$$

$$\Phi = \frac{H_{rx}}{\langle \rho C_p \rangle^s (T_0 - T_{amb})}$$

$$\Gamma = \frac{H}{\langle \rho C_p \rangle^s}$$

$$i = 2..n-1; j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + T_{i-1,j}] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = 1; j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + 1] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot \left(\frac{4T_{i,j} - T_{i,j+1}}{3} \right) - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = 1; j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + 1] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{sr}} \right] + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = n, j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{sz}} + T_{i-1,j} \right] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j+1}}{3} \right] - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = n, j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \left[\frac{4T_{n,j} - T_{n-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{sz}} + T_{i-1,j} \right] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{sr}} \right] + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = 2..n-1, j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + T_{i-1,j}] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j+1}}{3} \right] - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = 2..n-1, j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + T_{i-1,j}] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{sr}} \right] + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = 1, j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B [T_{i+1,j} + 1] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

$$i = n, j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \left[\frac{4T_{n,j} - T_{n-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{sz}} + T_{i-1,j} \right] + \left(X + \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j+1} + \left(X - \frac{E}{j} \right) \cdot T_{i,j-1} - \Phi \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j} + \Gamma \cdot T_{i,j}^a$$

Discretización para la fase gas

$$f_a \rho_a C p_a \frac{\partial T_a}{\partial t} = -\rho_a C p_a v_{\text{int}} \frac{\partial T_a}{\partial z} + \lambda_{\text{effz}} \frac{\partial^2 T_a}{\partial z^2} + \lambda_{\text{effr}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_a}{\partial r} \right) + H(T_s - T_a)$$

or

$$\frac{\partial T_a}{\partial t} = -v_{\text{int}} \frac{\partial T_a}{\partial z} + \alpha_{\text{effz}} \frac{\partial^2 T_a}{\partial z^2} + \alpha_{\text{effr}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_a}{\partial r} \right) + \frac{H}{f_a \rho_a C p_a} (T_s - T_a)$$

$$\frac{\partial T_a}{\partial t} = \frac{-v_{\text{int}}}{2\Delta z L} [T_{i+1,j} - T_{i-1,j}] + \frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} [T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}] + \frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2} [T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}] + \frac{\alpha_{\text{effr}}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} [T_{i,j+1} - T_{i,j-1}] + \frac{H}{\langle \rho C p \rangle^a} (T_{i,j}^s - T_{i,j})$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \left[-2 \frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} - 2 \frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{H}{\langle \rho C p \rangle^a} \right] \cdot T_{i,j} + \left[\frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} - \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right] T_{i+1,j} + \left[\frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} + \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right] T_{i-1,j} + \left[\frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2} + \frac{\alpha_{\text{effr}}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[\frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{\alpha_{\text{effr}}}{2 \cdot j \cdot \Delta r^2 L^2} \right] \cdot T_{i,j-1} + \frac{H}{\langle \rho C p \rangle^a} \cdot T_{i,j}^s$$

$$A = \left[-2 \frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} - 2 \frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2} - \frac{H}{\langle \rho C p \rangle^a} \right]$$

$$B = \frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} - \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L}$$

$$\Phi = \frac{\alpha_{\text{effz}}}{\Delta z^2 L^2} + \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L}$$

$$X = \frac{\alpha_{\text{effr}}}{\Delta r^2 L^2}$$

$$E = \frac{\alpha_{\text{effr}}}{2 \cdot \Delta r^2 L^2}$$

$$\Gamma = \frac{H}{\langle \rho C p \rangle^a}$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 2..n-1; j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 1; j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{4T_{i,1} - T_{i,2}}{3} \right] + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 1; j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{4T_{i,m} - T_{i,m-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{ar}} \right] + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = n, j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{az}} \right] + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{T_{i,j+1} - 4T_{i,j}}{3} \right] + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = n, j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{az}} \right] + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{4T_{i,m} - T_{i,m-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{ar}} \right] + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 2..n-1, j = 1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i,j+1}}{3} \right] + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 2..n-1, j = m$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot \left[\frac{4T_{i,m} - T_{i,m-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{ar}} \right] + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = 1, j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot T_{i+1,j} + \Phi + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

$$i = n, j = 2..m-1$$

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = A \cdot T_{i,j} + B \cdot \left[\frac{4T_{i,j} - T_{i-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{az}} \right] + \Phi T_{i-1,j} + \left[X + \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j+1} + \left[X - \frac{E}{j} \right] \cdot T_{i,j-1} + \Gamma \cdot T_{i,j}^s$$

Condiciones de frontera

Fase gaseosa

$$i = 0; z = 0$$

$$T = 1$$

$$i = n + 1; z = 1$$

$$\frac{dT}{dz} = -Nu_{az} T$$

$$T_{n+1,j} = \frac{4T_{n,j} - T_{n-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{az}}$$

$$j = 0; r = 0$$

$$\frac{dT}{dr} = 0$$

$$T_{i,0} = \frac{4T_{i,1} - T_{i,2}}{3}$$

$$j = m + 1; r = R$$

$$\frac{dT}{dr} = -Nu_{ar} T$$

$$T_{i,m+1} = \frac{4T_{i,m} - T_{i,m-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{ar}}$$

Valores iniciales

$$t = 0$$

$$C = C_0$$

$$X = X_0$$

$$S = S_0$$

Fase compuesta (sólido-líquido)

$$i = 0; z = 0$$

$$T = 1$$

$$i = n + 1; z = 1$$

$$\frac{dT}{dz} = -Nu_{sz} T$$

$$T_{n+1,j} = \frac{4T_{n,j} - T_{n-1,j}}{3 + 2\Delta z Nu_{sz}}$$

$$j = 0; r = 0$$

$$\frac{dT}{dr} = 0$$

$$T_{i,0} = \frac{4T_{i,1} - T_{i,2}}{3}$$

$$j = m + 1; r = R$$

$$\frac{dT}{dr} = -Nu_{sr} T$$

$$T_{i,m+1} = \frac{4T_{i,m} - T_{i,m-1}}{3 + 2\Delta r Nu_{sr}}$$

Oxígeno

$$i = 0; z = 0$$

$$C = 1$$

$$i = n + 1; z = 1$$

$$\frac{dC}{dz} = 0$$

$$C_{n+1,j} = \frac{4C_{n-1,j} - C_{n-2,j}}{3}$$

Discretización para la concentración de oxígeno

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} = -v_{\text{int}} \frac{\partial C_{O_2}}{\partial z} + D_{\text{eff}L} \frac{\partial^2 C_{O_2}}{\partial z^2} + \frac{Y_{O_2/S}}{f_a} \left(\frac{dS}{dt} \right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_{\text{int}} \frac{\partial C}{\partial z} + D_{\text{eff}L} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a} \left(\frac{dS}{dt} \right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{-v_{\text{int}}}{2\Delta z L} [C_{i+1,j} - C_{i-1,j}] + \frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} \cdot [C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}] + \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a} \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left[-2 \cdot \frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} \right] \cdot C_{i,j} + \left[\frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} - \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right] C_{i+1,j} + \left[\frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} + \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right] C_{i-1,j} + \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a} \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$A = \left[-2 \cdot \frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} \right]$$

$$B = \left[\frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} - \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right]$$

$$\Phi = \left[\frac{\wp_{e\text{ff}z}}{\Delta z^2 L^2} + \frac{v_{\text{int}}}{2\Delta z L} \right]$$

$$X = \frac{Y_{O_2/S}}{C_{O_2} f_a}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot C_{i+1,j} + \Phi \cdot C_{i-1,j} + X \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$i = 2..n - 1; j = 2..m - 1$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot C_{i+1,j} + \Phi C_{i-1,j} + X \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$i = 1;$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot C_{i+1,j} + \Phi + X \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$i = n$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot \left[\frac{4C_i - C_{i-1}}{3} \right] + \Phi C_{i-1,j} + X \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$i = 1, j = 2..m - 1$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot C_{i+1,j} + \Phi + X \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$

$$i = n, j = 2..m - 1$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = A \cdot C_{i,j} + B \cdot \left[\frac{4C_i - C_{i-1}}{3} \right] + \Phi C_{i-1,j} + X \cdot \left(\frac{dS}{dt} \right)_{i,j}$$