



Nova scientia

ISSN: 2007-0705

Universidad de La Salle Bajío A. C., Coordinación de Investigación

Jiménez Islas, Hugo; Oliveros Muñoz, Juan Manuel; González Brambila, Margarita Mercedes; Martínez González, Gloria María; Calderón Alvarado, Martha Patricia

Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)

Nova scientia, vol. 10, núm. 20, 2018, pp. 133-169

Universidad de La Salle Bajío A. C., Coordinación de Investigación

DOI: 10.21640/ns.v10i20.1282

Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=203358383008>

- Cómo citar el artículo
- Número completo
- Más información del artículo
- Página de la revista en redalyc.org

redalyc.org

Sistema de Información Científica Redalyc

Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal
Proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto

Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)
Mass transfer analysis in dual continuum models for biofiltration of volatile organic compounds (VOC's)

Martha Patricia Calderón Alvarado¹, Juan Manuel Oliveros Muñoz², Margarita Mercedes González Brambila³, Gloria María Martínez González¹ y Hugo Jiménez Islas¹

Palabras Clave: biofiltración; transferencia de masa; curva de ruptura; crecimiento microbiano
Keywords: biofiltration; mass transfer; rupture curve; microbial growth

Recepción: 22-01-2018 / Aceptación: 26-03-2018

Resumen

El presente trabajo explora y discute la deducción y aplicación de un modelo matemático genérico (Modelo de Interacción de Múltiples Continuos, MIMC) en la predicción del comportamiento dinámico de la eficiencia de un biofiltro de lecho fijo tratando tolueno. Se presenta una estrategia de solución numérica, incluyendo un caso de estudio de validación. Posteriormente se presentan estudios de variación de dos números adimensionales (Péclet y Sherwood) y su efecto sobre el comportamiento de la eficiencia del biofiltro. Para dos fases interactuando (Modelos Doble Continuos, MDC), tres niveles de sofisticación son contrastados, concluyendo que el fenómeno de crecimiento (comprendiendo desde el proceso de inoculación hasta la saturación del lecho) es crucial para realizar el diseño y modelamiento en sistemas de biofiltración al emplear MIMC's. Con MDC 2 se logró un ER<8% siendo el enfoque que más se acerca a los datos experimentales reportados en literatura.

Abstract

The present work explores and discusses the derivation and application of a generic mathematical model (Multiple Continuum Interacting Model, MCIM) in the prediction of the effectiveness dynamics for a trickling biofilter treating toluene. A computational solution strategy is presented, including the proper validation study case. Then, numerical studies for dimensionless Péclet and Sherwood numbers (Pe and Sh) are discussed; the effect of these over the efficiency biofilter behavior is shown. For Two Interacting Continuum phases (TIC), three sophistication levels are

¹Departamento de Ingeniería Química - Bioquímica. Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Celaya. E-mail: hugo.jimenez@itcelaya.edu.mx

²Unidad Especializada en Energías Renovables. Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de la Laguna. Torreón, Coahuila

³Departamento de Energía. Universidad Autónoma Metropolitana. Azcapotzalco, México, D.F.

© Universidad De La Salle Bajío (México)

compared, concluding that the growth phenomenon (including the inoculation process) is crucial for designing and modelling of biofiltrations systems by MIMC's. Achieving with MDC 2 an ER< 8% being the approach that comes closest to the experimental data reported in literature.

Introducción

La biofiltración es uno de los sistemas más emblemáticos para el tratamiento de gases contaminados. Esta tecnología implica la degradación metabólica de las especies químicas contaminantes (April *et al.*, 1998; Bouchez *et al.*, 1995). Para el caso de compuestos orgánicos volátiles (COV), los microorganismos implicados se desarrollan normalmente en forma de biopelícula sobre el soporte sólido de un medio poroso (Alonso *et al.*, 1998), y se hace fluir una fase gaseosa a través de los espacios vacíos que suministra las especies químicas contaminantes (sustrato). La fase gaseosa mantiene un estrecho contacto con la biopelícula a lo largo del dispositivo, lo que permite que la transferencia de masa interfacial tenga lugar (Devinny y Ramesh, 2005). La metabolización de COV's frecuentemente es completa, por lo que se obtiene dióxido de carbono y agua como productos finales (Malhautier *et al.*, 2005).

Los biofiltros pueden ser operados con eficiencia de remoción estable bajo ciertas condiciones, por ejemplo; un espesor de biopelícula acotado (condición íntimamente ligada a la caída de presión y el tiempo de residencia de la fase fluida), humedad adecuada (Leson y Winter 1991, Ottengraf 1986, Van Lith *et al.*, 1990), temperatura optima (Wani *et al.*, 1997), y pH. Estas condiciones han de ser impuestas mediante control dinámico, ya que, por su naturaleza, la biopelícula ha de crecer hasta saturar el lecho. En este contexto, resulta de vital importancia predecir el momento exacto en que es necesaria una etapa de mantenimiento (generalmente un lavado de la biomasa), tarea que, desde un punto de vista racional, debe ser abordada mediante modelación matemática.

En el estudio del proceso de biofiltración los modelos matemáticos se han planteado como una herramienta de diseño y escalamiento, la complejidad del sistema ha obligado a considerar diversas hipótesis sobre los fenómenos involucrados tratando de simplificar el problema. De entre los primeros modelos matemáticos propuestos para degradar sustratos en filtros biológicos sumergidos, destaca el empleo del modelo de Monod, que fue propuesto por Jennings *et al.*, 1976. Posteriormente Ottengraf (1977) señala la importancia de considerar la difusión en el modelo propuesto por Jennings *et al.*, 1976. Ottengraf y Van Den Oever (1983) plantean el primer modelo

matemático para el proceso de biofiltración; sin embargo, este modelo carece de validez para concentraciones de sustrato demasiado bajas o en casos en los que la biomasa ha obstruido completamente el lecho. Hirai *et al.* (1990) también consideran el biofiltro como un reactor con flujo tapón, modelando la reacción con la ecuación de Monod. El reactor se considera como un medio homogéneo y se desprecian los procesos de transporte entre fases. Estas suposiciones subsanan la baja predictibilidad del modelo para concentraciones de sustrato muy pequeñas. Sin embargo, el modelo propuesto tampoco posee capacidades predictivas como cuando la concentración de sustrato es inhibitoria de la actividad microbiana. Shareefdeen *et al.* (1993) desarrollaron un modelo matemático en estado estable considerando la limitación por doble sustrato (metanol y oxígeno) empleando el modelo de Haldane-Andrews (inhibición por sustrato) para el consumo de metanol y cinética de Monod para la concentración de oxígeno. Emplean conceptos como la densidad de la biopelícula y parámetros asociados a la cinética de consumo. En este punto, la cinética de consumo y crecimiento es robusta, pero aún no es posible predecir el momento en que debe aplicarse alguna estrategia de mantenimiento (estado estable).

Hodge y Devinny (1994) proponen un modelo que describe las interacciones entre la convección, dispersión, adsorción y la degradación biológica del etanol en el proceso de biofiltración. La transferencia de contaminantes desde el aire a las fases sólida/acuosa y la degradación biológica del sustrato por medio de una cinética de primer orden, sin involucrar el concepto de biopelícula, considerando la producción y acumulación de CO₂ y los cambios de pH resultantes debido a este fenómeno. Este modelo es sencillo pero limitado a las peculiaridades fisicoquímicas y biológicas del sistema estudiado. Shareefdeen y Baltzis (1994a) proponen un modelo dinámico para la degradación de tolueno que, a diferencia del modelo propuesto por Shareefdeen *et al.* (1993), considera el desarrollo parcial de la biopelícula sobre la superficie del medio poroso, incluyendo términos de adsorción en la superficie donde existe un contacto directo entre las fases gas-sólido. Estos modelos demandan una gran cantidad de parámetros de ajuste y supone o fija arbitrariamente la densidad de biopelícula, rendimiento, área específica, espesor de biopelícula, entre otros términos.

Hodge y Devinny (1995) desprecian el fenómeno de difusión en la biopelícula. Sin embargo, Ottengraf (1977) y Shareefdeen *et al.* (1997) demuestran que dicho fenómeno no puede ser despreciado. También se demuestra que despreciar el consumo de oxígeno y sus efectos sobre la cinética de crecimiento puede conducir al cálculo de eficiencias de remoción poco realistas.

Deshusses *et al.* (1995) consideran el análisis de la fase gaseosa, sin modificaciones a los trabajos clásicos de Ottengraf y Van den Oever (1983) y de Shareefdeen *et al.* (1993).

Devinny *et al.* (1998) desarrollan un modelo para predecir la eficiencia de remoción tomando en cuenta once compuestos orgánicos volátiles. Empleando relaciones cuantitativas estructura-actividad, concluyen que tres parámetros son importantes en la operación del sistema de biofiltración entre ellos la constante de Henry (Aizpuru *et al.*, 2002). Sin embargo, esta clase de estudios requiere un gran número de datos experimentales y se limita a las condiciones en las que se llevó a cabo. Alonso *et al.* (2001) validan un modelo para el tratamiento de éter en un biofiltro percolador de lecho sintético (partículas esféricas), analizando la adición de nitrato como nutriente y un lavado periódico para eliminar el exceso de biomasa. El modelo consta de dos ecuaciones en coordenadas cilíndricas (bidimensionales); una describe la transferencia de masa en la fase gaseosa y la otra; la difusión y reacción en la biopelícula. La concentración de éter y nitrato (NO_3 fuente de nitrógeno) en la biopelícula se modela mediante una cinética doble de Monod. El modelo propuesto es capaz de predecir la caída de la eficiencia debida al crecimiento microbiano.

Qasim y Shareefdeen (2013) describen brevemente algunos de los modelos matemáticos considerados como base para el desarrollo de nuevos modelos destacando: Ottengraf y Van den Oever (1983), Shareefdeen *et al.* (1993), Shareefdeen y Baltzis (1994a, b), Deshusses *et al.* (1995), Park y Jung (2006), Yang *et al.* (2006), Liao *et al.* (2008), Chen *et al.* (2009), Spigno *et al.* (2004) y Baquerizo *et al.* (2005). Sin embargo, Qasim y Shareefdeen (2013) concluyen que los modelos siguen siendo limitados por su aplicabilidad específica debido a que cada grupo de investigación plantea su propio enfoque y no es posible generalizar a cualquier proceso de biofiltración. Qasim y Shareefdeen (2013) también analizan el modelo propuesto por Li y Visscher (2008) para biodegradación de tolueno, basándose en el trabajo de De Visscher y Van Cleempunt (2003). Por otra parte, Li y Visscher (2008) desarrollan tres modelos: El primero y segundo consideran la cinética de Monod y Haldane respectivamente, combinadas con el modelo logístico. El tercero analiza la variación del flujo de contaminantes a la entrada del biofiltro. La validación del modelo propuesto se hace con datos experimentales de Zamir *et al.* (2011) y Park y Jung (2006). Li y Visscher (2008) concluyen que los parámetros μ'_{\max} (velocidad máxima de crecimiento), K_m (constante de mantenimiento) y K_I (constante de inhibición) tienen una influencia decisiva en la eficiencia de la biofiltración.

Hwang y Tang (1997) proponen ecuaciones gobernantes para explicar las interacciones entre la adsorción, la microcinética, la transferencia de masa y el régimen de flujo en el proceso de biofiltración; se plantean tres balances de masa para la fase sólido-biopelícula incluyendo el balance de tolueno en la biopelícula con los fenómenos de difusión y reacción (Monod), un balance para tolueno por difusión y adsorción (Langmuir) en el soporte y la difusión-adsorción en las partículas inertes. Finalmente se plantea un balance en la fase gaseosa donde se considera flux de tolueno hacia la interface de la biopelícula y la superficie de las partículas inertes. La cantidad de tolueno adsorbido por la composta y por las partículas inertes fue estimada de manera independiente, determinando la influencia de las propiedades del material del medio poroso en el comportamiento dinámico del biofiltro. Además, se consideró el tiempo de adaptación para el crecimiento microbiano, mediante una ecuación empírica.

Otra clase de modelos (propuestos con la metodología del promedio volumétrico) se han empleado tanto para el tratamiento de aguas residuales (Iliuta y Larachi, 2004), como para el tratamiento de gases contaminados (Mysliwiec *et al.* 2001). En este caso, se plantean balances para el gas y la fase liquida, y la ecuación de continuidad para la fase sólida y las ecuaciones son promediadas para partículas esféricas. Esta clase de modelos implica una gran cantidad de trabajo algebraico y suelen estar limitados ante la naturaleza intrínsecamente cambiante de los lechos porosos que contienen biopelículas en crecimiento.

Los modelos tradicionales (transporte-consumo), incluyendo las propuestas contemporáneas, tienen las mismas limitantes; fallas al predecir el crecimiento y la caída en la eficiencia asociada a éste y una gran cantidad de parámetros/fenómenos, que limitan su aplicación a casos muy específicos. En este contexto, se considera una última clase de modelos de transporte que no ha sido ampliamente reportada para biofiltración, constituidos por los Modelos de Interacción de Múltiples Continuos (MIMC), que consideran al medio poroso como un conjunto de sistemas de dos o más fases separadas en las que el transporte de momentum, calor y masa se analizan por separado y se acoplan conceptualmente (Pruess y Narasimhan, 1982). Cada fase continua posee un grupo de propiedades específicas que se aplican a sus propias ecuaciones (balances microscópicos). Los distintos balances (para cada fase) requieren de un término adicional de acoplamiento que engloba todos los fenómenos desconocidos (velocidad de la fase gaseosa, geometría de la biopelícula, zonas de condensación de agua, biopelículas inactivas, entre muchos otros), que evita tener que especificar la interfase en sistemas tan complejos como los son los

biofiltros (Hao *et al.*, 2013; Duddu *et al.*, 2009). Delay *et al.*, (2013) proponen el empleo de un Modelo Doble Continuo (MDC) para el análisis de la influencia del crecimiento de biopelícula en medio poroso sobre las curvas de ruptura del proceso. Los autores reportan la clásica caída acelerada de la concentración de contaminante a tiempos cortos del proceso, así como la tendencia asintótica de esta variable a tiempos mayores. Sin embargo, los autores no muestran resultados para tiempos grandes de operación, en los que típicamente, el crecimiento de la biopelícula obstruye el flujo de la fase gaseosa, en parte porque el modelo que proponen intrínsecamente carece de capacidades predictivas en esas condiciones. En este sentido, una de las principales desventajas de los modelos MIMC es la incertidumbre asociada a la capacidad de las propiedades y términos artificiales (pseudo-homogeneizados) de acoplamiento para capturar las principales características del medio poroso. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo es explorar las capacidades predictivas de los modelos MIMC en biofiltros a tiempos grandes de operación, a la vez que se propone una modificación que permite predecir curvas de ruptura para la biodegradación de COV's.

Metodología

Se propone un modelo doble continuo (MDC) en tres niveles de sofisticación. El primero (MDC1) es el más sencillo (Delay *et al.*, 2013), ya que únicamente contiene términos de transporte y consumo microbiano. Este modelo se emplea para demostrar las limitaciones de este tipo de modelos en sistemas que contienen biopelículas creciendo. El segundo (MDC2) incluye una variable que representa el crecimiento espacial de la biopelícula en una versión volumétrica, con este modelo se predicen curvas de remoción/ruptura reportadas en literatura. El tercero (MDC3), incluye, además de las consideraciones de MDC2, una estrategia de distribución aleatoria del inóculo al inicio de las simulaciones tomada de Oliveros-Muñoz *et al.* (2017), lo que permite predecir la aparición de zonas obstruidas en los biofiltros.

Modelo Doble Continuo 1 (MDC1)

Los dos procesos principales que ocurren en un biofiltro son; las transformaciones bioquímicas (consumo de sustrato) y el transporte (difusión, convección y transporte interfacial) (Devinny y Ramesh, 2005). Para una sola especie química (COV), se consideran los balances microscópicos para la fuente de carbono (especie química A) en el medio poroso (Ecuación 1) y en la fase fluida (Ecuación 2). La Ecuación 1 considera que el consumo del sustrato por los microorganismos del

biofiltro genera gradientes de concentración que impulsan el transporte difusivo de masa desde la fase fluida hacia el medio poroso, a través de la interfase medio poroso-fluido. Los gradientes formados crean nichos específicos, por ejemplo, el aire de la alimentación puede no acceder por igual a todo el biofiltro, generando zonas de crecimiento lento y formación de canales preferentes de flujo (Ozis *et al.*, 2007), por lo que se emplea un modelo 2-D. En la Ecuación 1, el término de consumo, como muchos autores que estudian la fermentación en estado sólido señalan, se considera linealmente proporcional al crecimiento microbiano (Klapper y Dockery 2010; Orgogozo *et al.*, 2013; Friedman *et al.*, 2014; Boraey *et al.*, 2015), no aplicando cuando el crecimiento está limitado por la cantidad de sustrato disponible, la limitación de nutrientes (en lechos sintéticos) (Gaudin *et al.*, 2005), la muerte celular, entre otros factores. Sin embargo, el consumo por mantenimiento continúa y la biopelícula desempeña un papel importante como reservorio de sustrato biodisponible para períodos de inanición (Laspidou y Rittmann 2004). Para modelar el consumo de substrato, se emplea la cinética de Monod (no estructurada cuasiestacionaria) (ver definición de μ en las Ecuaciones 1 y 3) (Golfier *et al.*, 2009). En el caso de la biomasa, se estableció un modelo logístico para delimitar la cantidad máxima de biomasa de acuerdo con Serial *et al.*, 1995 y Alonso *et al.*, 1998 (17 kg de biomasa/m³); sin embargo, otros autores han reportado valores superiores de máximo desarrollo de biomasa para biofiltración; (Karrabi *et al.*, 2011) de 25-30 kg de biomasa/m³ para fenol; (Ozis *et al.*, 2007) de 30 kg de biomasa/m³ para etanol y (Singh *et al.*, 2010) de 23.6 kg de biomasa/m³ para tolueno. Así mismo, se ha propuesto un modelo de primer orden para calcular la cantidad de sustrato empleado en el mantenimiento celular (Van Bodegom, 2007).

En la ecuación 1, los términos; dinámico, de transporte molecular y consumo son multiplicados por la fracción vacía ($1-\varepsilon$), mientras que para la Ecuación 2, los términos; dinámico, de transporte molecular y convectivo son multiplicados por la fracción porosa (porosidad ε). Para el transporte interfacial, se considera la formación de una capa límite carente de volumen (Bird *et al.*, 2002), entonces, para ambas ecuaciones (1 y 2), los términos correspondientes no se multiplican por fracción volumétrica alguna, éstos se construyen como expresiones puntuales globales que son función de las características geométricas del sistema y de sus condiciones de operación, tal como los coeficientes volumétricos de transferencia de masa en tanques continuos agitados (Piché *et al.*, 2002). Un esquema conceptual del sistema descrito se muestra en la Figura 1 el cual describe los tres niveles de sofisticación para MDC.

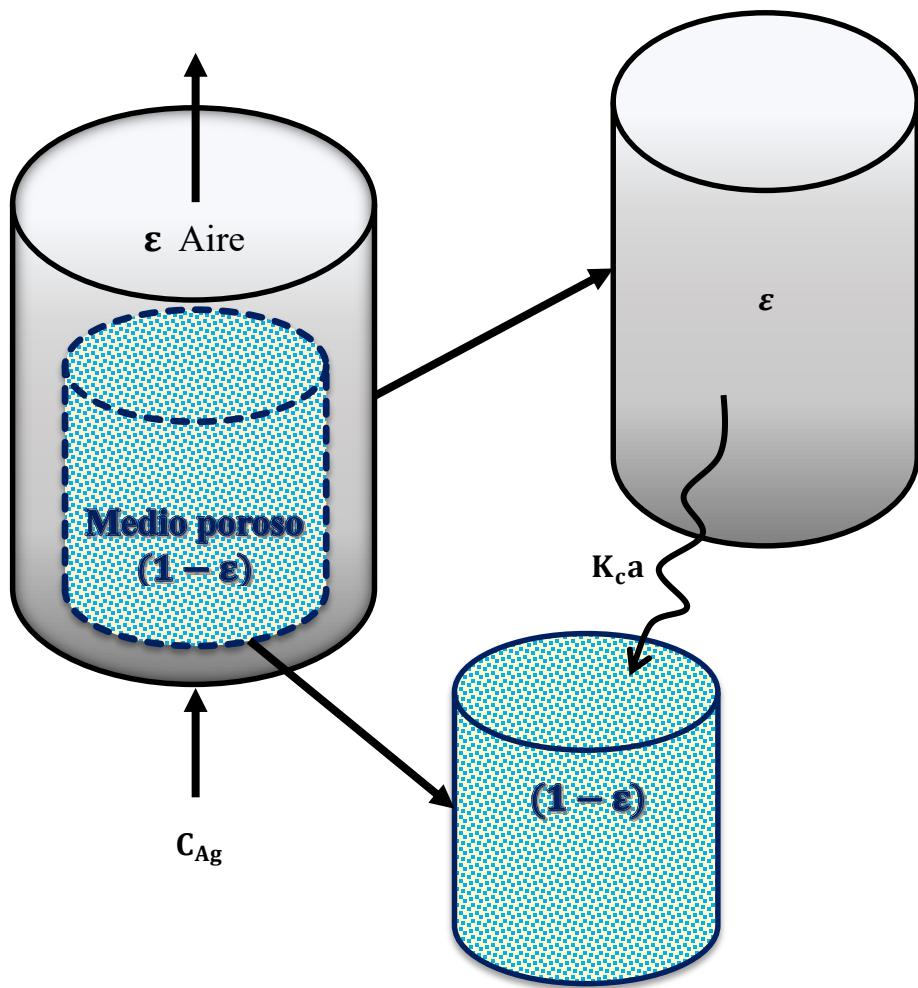


Figura 1. Esquema conceptual de los tres niveles de sofisticación del modelo MDC.

Para el cálculo del perfil de velocidades se emplea la ecuación de Darcy, ya que las condiciones de operación del proceso de biofiltración normalmente ocurren en rangos apropiados para el número de Darcy ($Da < 1 \times 10^{-8}$) (Jiménez-Islas, 1999). En los tres niveles de sofisticación, se considera un sistema isotérmico en régimen laminar. La Ecuación 3 se postula para mantener la naturaleza conceptual del modelo MDC al considerar la densidad de biomasa como una propiedad volumétrica distribuida en el interior de ductos cilíndricos (simplificación del lecho poroso).

Balance microscópico para la especie química A en el medio poroso:

$$(1 - \varepsilon) \frac{\partial C_{As}}{\partial t} = (1 - \varepsilon) D_{eff} \left[\frac{\partial^2 C_{As}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{As}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{As}}{\partial z^2} \right] + k_C a \left[\frac{C_{Ag}}{H} - C_{As} \right] \\ - (1 - \varepsilon) \left(1 - \frac{X_M}{X_{max}} \right) \left(\frac{\mu_{max} C_{As}}{k_s + C_{As}} \right) \frac{X_M}{Y \frac{x}{C_A}} - (1 - \varepsilon) m X_M \quad (1)$$

Donde:

$$C.F.1 \quad \left. \frac{\partial C_{As}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$$

$$C.F.2 \quad \left. \frac{\partial C_{As}}{\partial r} \right|_{r=R} = 0$$

$$C.F.3 \quad \left. \frac{\partial C_{As}}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$

$$C.F.4 \quad \left. \frac{\partial C_{As}}{\partial z} \right|_{z=L} = 0$$

$$C.I. \quad C_{As}|_{t=0} = C_{As}^0$$

Balance microscópico para la especie química A en la fase fluida:

$$\varepsilon \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} = \varepsilon D_{Ag} \left[\frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{Ag}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial z^2} \right] - \varepsilon v_z \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} - k_C a \left[\frac{C_{Ag}}{H} - C_{As} \right] \quad (2)$$

Donde:

$$C.F.1 \quad \left. \frac{\partial C_{Ag}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$$

$$C.F.2 \quad \left. \frac{\partial C_{Ag}}{\partial r} \right|_{r=R} = 0$$

$$C.F.3 \quad C_{Ag}|_{z=0} = C_{Ag}^e$$

$$C.F.4 \quad \left. \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right|_{z=L} = 0$$

$$C.I. \quad C_{Ag}|_{t=0} = C_{Ag}^0$$

Balance de densidad de biomasa:

$$\frac{\partial X_M}{\partial t} = \left(\frac{\mu_{max} C_{As}}{k_s + C_{As}} \right) \left(1 - \frac{X_M}{X_{max}} \right) X_M - k_d X_M \quad (3)$$

Donde:

$$C.I. \quad X|_{t=0} = X_0$$

Las ecuaciones 1 a 3 fueron adimensionalizadas para obtener relaciones explícitas entre algunas dimensiones características del sistema y algunos fenómenos importantes, como el transporte

interfacial y el transporte convectivo (Número de Sherwood, Sh) (Wongsuchoto *et al.*, 2003), o las relaciones entre el transporte convectivo y el transporte difusivo de masa en el sistema (Número de Péclet, Pe). El modelo adimensional se presenta en el Apéndice A.

Modelo Doble Continuo 2 (MDC2)

Además de las ecuaciones planteadas para MDC1, MDC2 considera que el lecho poroso está compuesto por múltiples ductos cilíndricos (de radio R_p) deslocalizados, que equivalen al lecho poroso (en caída de presión, área superficial, tortuosidad, etc.). Cada ecuación nodal (resultante de la discretización) se asocia con el incremento de un espesor de biopelícula hipotético (L_f) (Ecuación 4).

$$L_f = R_p - \sqrt{\frac{\pi R_p^2 L - \frac{X_M}{X_{bf}}}{\pi L}}, \text{ donde } X_M = f(z, r) \therefore L_f = f(z, r) \quad (4)$$

Debido a que la geometría de los ductos hipotéticos se ha considerado cilíndrica, el área superficial de la interfase (A_{sf}), la velocidad axial promedio de la fase móvil (v_z) y otras propiedades se actualizan en cada etapa temporal durante la resolución del modelo. En las ecuaciones 5 y 6 se muestran las relaciones explícitas de los números de Péclet y Sherwood modificados con L_f .

$$Sh_m = \frac{R^2 k_C a}{D_{Ag}} = \frac{R^2 k_C 2\pi(R_p - L_f)L}{D_{Ag}} \quad (5)$$

$$Pe_m = \frac{Q}{\pi(R_p - L_f)^2 D_{Ag}} \frac{L}{D_{Ag}} \quad (6)$$

Modelo Doble Continuo 3 (MDC3)

Uno de los fenómenos más importantes de los sistemas de biofiltración es la obstrucción del lecho poroso debida al crecimiento de los microorganismos (bioobstrucción) (Oliveros-Muñoz *et al.*, 2017; Arellano-García *et al.*, 2015) y la consecuente formación de zonas estancadas y canales preferentes de flujo (Devinny y Ramesh, 2005). La bioobstrucción se origina por un rápido crecimiento de la biomasa, sobre todo en las zonas cercanas a la entrada del biofiltro comparadas con la salida, así como por una distribución heterogénea del inóculo. En MDC3 se incluye una estrategia pseudo-aleatoria (el tiempo de reloj es usado como semilla de la subrutina RAND de

FORTRAN 90 ®) para la distribución inicial de la densidad de biomasa. El espesor de la biopelícula ($L_f = f(r, z)$) se calcula a partir de esta consideración.

Herramientas computacionales

Todos los cálculos fueron efectuados en una estación de trabajo Intel Xeon® E5–2620 v3 procesador dual con 64 GB de RAM (Sistemas AZTX, Celaya, Gto., México), Windows 7 Ultimate® OS, y compilador Intel FORTRAN Composer 2013®.

Código FORTRAN BIOFILF2

El código computacional empleado en este trabajo está basado en diferencias finitas para discretizar los operadores espaciales y el método de Runge-Kutta-Fehlberg para la integración de los operadores temporales, tal como se describe en la Figura 2. Previamente este mismo código computacional ya se había empleado para la solución del modelo propuesto por Calderón-Alvarado *et al.* (2016).

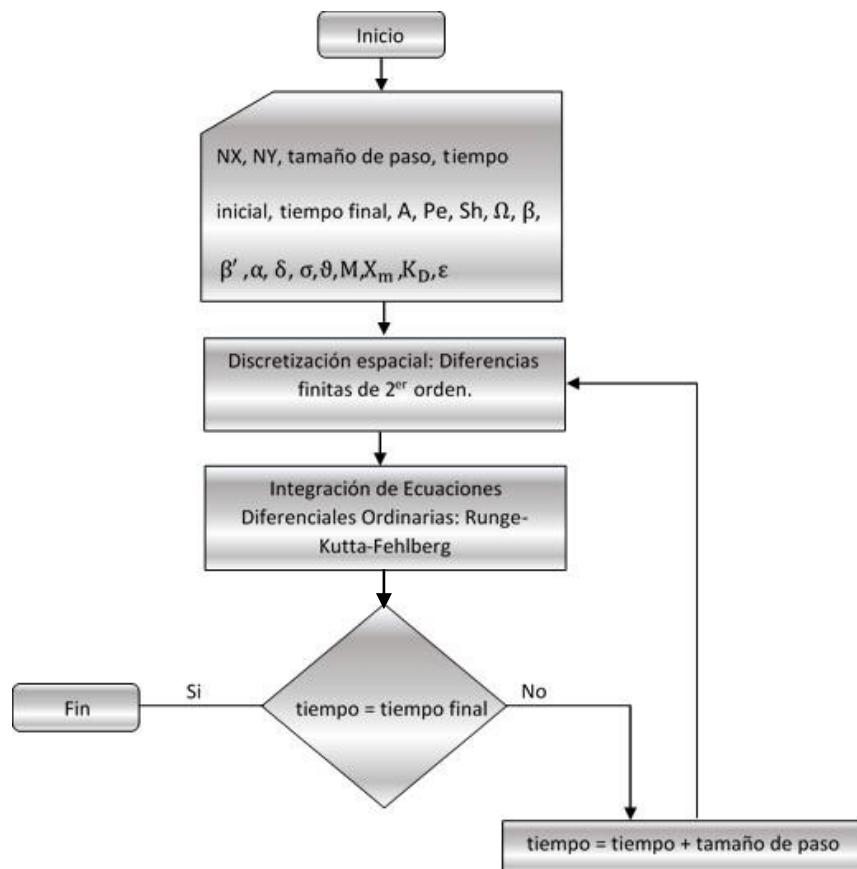


Figura 2. Diagrama de flujo de BIOFILF2.

En todos los casos de estudio, los tamaños de etapa de integración y malla de discretización espacial son fijados para mantener una condición optima de Courant-Friedrichs-Lowy (CFL<1) Eberl *et al.*, (2001).

Resultados

Validación del código: Convección natural de aire en una cavidad 2-D diferencialmente calentada
Se tiene aire en una cavidad cuadrada 2-D con dimensiones L. Las paredes verticales se mantienen a las temperaturas T_h y T_c , y las paredes horizontales se mantienen aisladas, lo cual implica que la temperatura a lo largo de éstas varía linealmente entre las temperaturas impuestas (T_h y T_c). Sin embargo, dentro de la cavidad, las isotermas adoptan múltiples contornos no lineales. El aire dentro de la cavidad es considerado como un fluido Newtoniano cuya densidad se estima mediante la aproximación de Boussinesq (densidad constante excepto en los términos volumétricos de los balances microscópicos). Esta aproximación solamente es válida para gases ideales y pequeños gradientes de temperatura sin fuerzas superficiales externas. Las fuerzas viscosas e inerciales son despreciadas. Las ecuaciones adimensionales (Ecuaciones 7 a 9) que describen el fenómeno en términos de función corriente y vorticidad son:

Ecuación de vorticidad:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} - \omega = \frac{\partial \Psi}{\partial F_o} \quad (7)$$

Ecuación de momentum:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial \omega}{\partial Y} - \frac{\partial \omega}{\partial X} \frac{\partial \Psi}{\partial Y} - Pr \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial Y^2} \right] - RaPr \frac{\partial \theta}{\partial X} = \frac{\partial \omega}{\partial F_o} \quad (8)$$

Ecuación de energía:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2} - \frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial \theta}{\partial Y} - \frac{\partial \Psi}{\partial Y} \frac{\partial \theta}{\partial X} = \frac{\partial \theta}{\partial F_o} \quad (9)$$

Condiciones de frontera:

$$X = 0; \quad \Psi = 0; \quad \theta = 1$$

$$X = 1; \quad \Psi = 0; \quad \theta = 0$$

$$Y = 0; \quad \Psi = 0; \quad \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0$$

$$Y = 1; \quad \Psi = 0; \quad \frac{\partial \theta}{\partial Y} = 0$$

Para la vorticidad se emplea la aproximación de Woods (Roache, 1972):

$$\omega_b = \frac{3\psi_{b+1} - \psi_b}{\Delta n^2} - \frac{\psi_{b+1}}{2}$$

Donde b y b+1 denotan las fronteras y sus nodos adyacentes, respectivamente. La Figura 3 muestra las etapas finales (variación de las variables dependientes con respecto al tiempo menor a 1×10^{-6}) del cálculo de BIOFILF2 para $0 \leq Ra \leq 1 \times 10^5$, las cuales son comparables con los estados estables reportados (benchmark) por De Vahl Davis (1983).

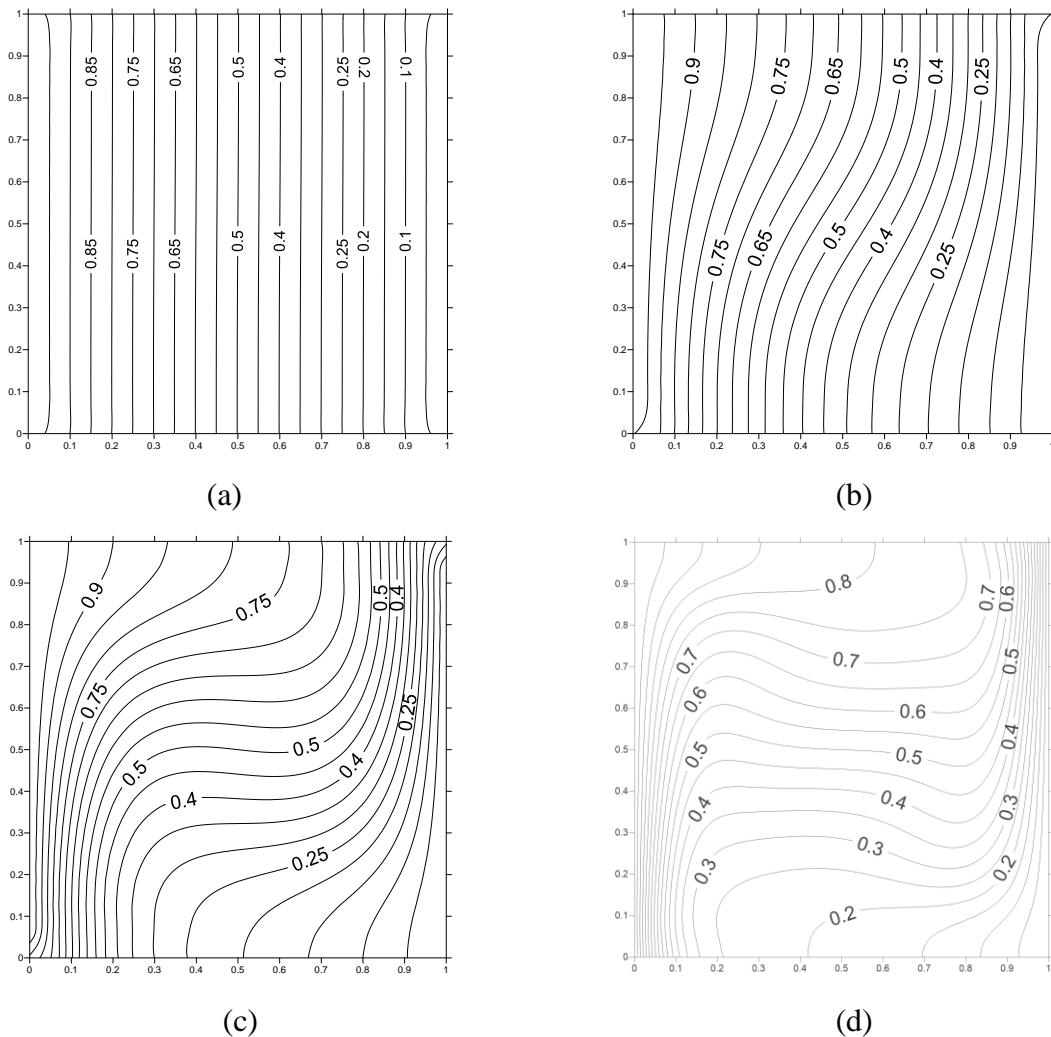


Figura 3. Isotermas en el estado estable ($< 1 \times 10^{-6}$) para una cavidad 2-D obtenidas mediante BIOFILF2. (a) $Ra=10$, (b) $Ra=1000$, (c) $Ra=1 \times 10^4$ y (d) $Ra=1 \times 10^5$.

Modelo Doble Continuo (MDC)

Para los tres niveles de sofisticación se emplearon valores típicos de biofiltración de COV's. En la Tabla 1 se enlistan los parámetros usados para los tres niveles de sofisticación MDC1, MDC2 y MDC3, los grupos adimensionales que demandan los parámetros se enlistan en el Apéndice A.

Tabla 1. Parámetros fisicoquímicos para biofiltración de tolueno (Serial *et al.*, 1995; Alonso *et al.*, 1998).

Parámetros	Valor	Unidades
K_{ca}	0.00111	s^{-1}
R	0.146	m
D_{eff}	0.000000001	$m^2 s^{-1}$
H	0.338	$kg m^{-3}$ gas/ $kg m^{-3}$ Biopelícula
C_{Ag}^0	0	$kg m^{-3}$
C_{Ag}^e	0.002	$kg m^{-3}$
D_{Ag}	0.0000095	$m^2 s^{-1}$
L	1.2	m
C_{As}^0	0	$kg m^{-3}$
K_s	0.00015	$kg m^{-3}$
μ_{max}	3.47222×10^{-5}	s^{-1}
\dot{Q}	7.96395×10^{-8}	$kg m^{-3}$
X_0	6.8	kg de Biomasa m^{-3}
X_{max}	17	kg de Biomasa m^{-3}
$\frac{Y_x}{C_A}$	0.84	kg de Biomasa/kg C_A
X_M	17	kg de Biomasa m^{-3}
ε	0.34	Adimensional
K_d	0.0000005	s^{-1}
m	0.04	$kg C_A / kg$ de Biomasa h^{-1}
C_{As}^{max}	0.003	$kg m^{-3}$
X_{bf}	2	$kg m^{-3}$
Rp	4	mm

Análisis de independencia de malla

Se realizó un análisis de independencia de malla, considerando un malla adecuado de 40 x 40 para los tres niveles de sofisticación obteniéndose un error relativo menor al 1% como se muestra en la Tabla 2. El incremento de la malla no muestra mejoras significativas por lo cual ya no se realizó el análisis para una malla mayor al reportado.

Tabla 2. Análisis de independencia de malla para los tres niveles de sofisticación.

Malla	Error relativo porcentual		
	MDC1	MDC2	MDC3
25x25	1.12	0.98	2.4
30x30	0.92	0.77	1.85
35x35	0.64	0.54	1.23
40x40	0.46	0.39	0.99

Modelo Doble Continuo 1 (MDC1)

Transferencia interfacial

De acuerdo con la definición empleada del número de Sherwood (Ecuación 5), es posible estudiar la transferencia de masa en la interfase del sistema al analizar su comportamiento en función de distintos valores que éste puede adoptar. La Figura 4 muestra el comportamiento de la curva de remoción de un biofiltro (cuyas características se resumen en la Tabla 3) para cuatro casos posibles; $Sh=0$, para transferencia nula; $Sh=1$, para una velocidad de transferencia interfacial comparable a la transferencia difusiva en la fase fluida; $Sh=2$, para una velocidad de transferencia interfacial dos veces más rápida que la difusión en el fluido, y $Sh=10$, para una velocidad de transferencia interfacial diez veces mayor a la transferencia molecular en el fluido. Rangos reportados en la Tabla 3; dentro de los cuales parámetros reportados por Baquerizo *et al.*, 2005 nos llevan a $Sh=2.53$ y parámetros reportados por Spigno *et al.*, 2004 a $Sh=10.08$ para número de Sherwood.

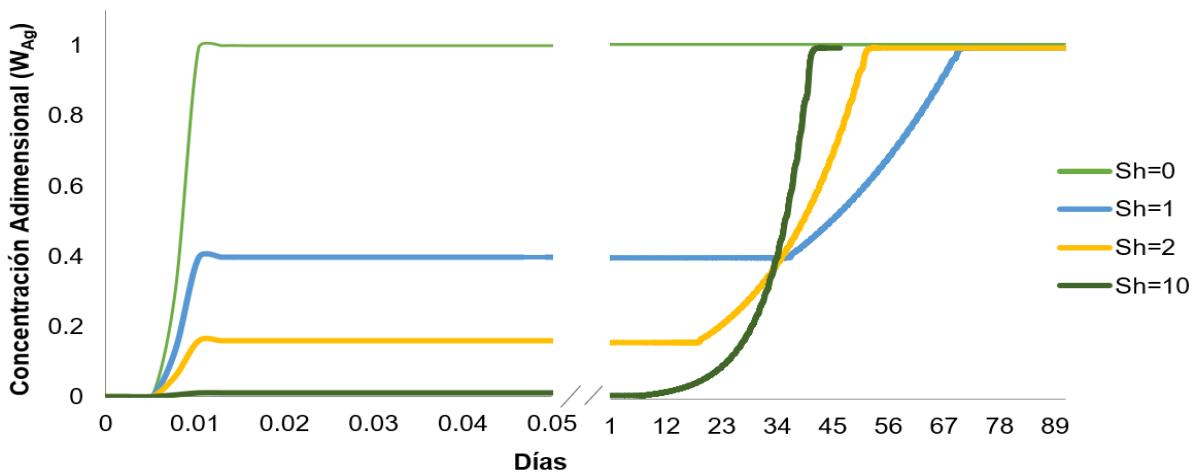


Figura 4. Cinética de concentración adimensional promedio a la salida del biofiltro a diversos números de Sherwood.

En la Figura 4, se muestra la influencia del número de Sherwood sobre la tasa máxima de remoción de contaminantes. Al incrementarse este número adimensional, la concentración adimensional promedio a la salida del biofiltro decrece. Así mismo, el punto de ruptura del sistema se desplaza (se acorta el tiempo en el que se pierde eficiencia) con el cambio del Sh. Para sistemas con $Sh=0$, se evoluciona rápidamente hacia el estado estable (concentración adimensional $W_{Ag} = 1$), con lo que el pequeño retardo de las gráficas se ve representado como una vertiginosa subida en la concentración adimensional al inicio de la simulación. Estos resultados (tasa de remoción máxima) son consistentes con los reportes de la literatura, resumidos en la Tabla 3, construida aplicando la correlación de Hartmans y Tramper (1991) para fermentación en estado sólido ($Sh = 2 + 0.57Re^{0.5}Sc^{0.33}$) sobre diversos estudios experimentales en biofiltración.

Tabla 3. Resumen de reportes de literatura sobre la eficiencia de remoción y el transporte interfacial de masa.

Sistema de Biofiltración	Descripción	Re	Sc	Sh	Pe	Eficiencia de Remoción (%)	Referencia
Mezcla de turba y cuencas de vidrio	Pseudomonas Putida Fenol	50.98	7.98	10.08	407.36	Mayor a 90	Spigno <i>et al.</i> , 2004
Mezcla de volumen dos de turba / tres de perlita (turba-perlita 2:3)	Consorcio de bacterias Metanol	129.28	11.41	16.47	1475.68	Mayor a 95	Shareefdeen y Baltzis, 1994a, b; Shareefdeen <i>et al.</i> , 1993
Composta, carbón activado granular, y una mezcla de composta y tierras diatomeas	Comunidad Microbiana Etanol	31.27	1.45	5.60	45.42	Entre 50 y 95	Hodge y Devinny, 1995
Mezcla de composta y carbón	Consorcio microbiano	19.62	1.68	4.99	33.01	Mayor a 99	Abumaizar <i>et al.</i> , 1997

activado granular (CAG)	(BTEX) Tolueno						
Turba y composta	Consorcio microbiano (Thinner) Tolueno Consorcio microbiano endógeno de la fibra de coco Amoníaco Consorcio activado específico de especies microbianas, EVB 110 fue utilizado (GSI Environment Inc, Sherbrooke). Estireno	242.67	1.68	12.54	408.18	Mayor a 95	Ottengraf y Van Den Oever, 1983
Fibra de Coco		1.26	0.57	2.53	0.72	Mayor a 90	Baquerizo <i>et al.</i> , 2005
Partículas solidas		24.30	2.25	5.67	54.69	Entre 51,7 y 83	Jorio <i>et al.</i> , 2003
Soporte peletizado	Pseudomonas putida Tolueno	8.87	1.68	4.01	14.93	Mayor a 99	Alonso <i>et al.</i> , 1998

La caída en la eficiencia de remoción que se observa en la Figura 4 es un fenómeno que no ha sido ampliamente estudiado desde un punto de vista teórico. Las consideraciones de diseño para biofiltros comúnmente se establecen con base en sistemas experimentales que rara vez son llevados a la condición de ruptura, por el contrario, numerosas estrategias de remoción de biomasa han sido desarrolladas y publicadas (Xi *et al.*, 2015). DCM1 es capaz de predecir una caída de eficiencia debido a que la concentración de sustrato en el medio poroso eventualmente alcanza la máxima concentración posible (una fracción de la concentración del gas) permitida por la constante de partición de Henry (Figura 5). En este punto el transporte interfacial se desvanece y comienza una caída abrupta de la eficiencia del dispositivo que sería instantánea si no existiese tiempo de retención. DCM1 está basado en el trabajo de Delay *et al.* (2013), quienes encontraron un comportamiento similar (asintótico/estable) reportando un sistema estable, que cabe esperar para modelos con entradas/salidas que pueden ser equilibradas por el consumo/producción, como el que

puede interpretarse para un solo nodo del dominio del biofiltro discretizado. Cabe resaltar que el mencionado reporte de los autores no presenta tiempos superiores a 3 horas de simulación ni discusión al respecto. En la Tabla 4 se muestran el resumen de las expresiones adimensionales que se calcularon con base a los parámetros que se reportan en la Tabla 1 para solución del modelo MCD1.

Tabla 4. Grupos adimensionales para el estudio de MDC1.

Grupos adimensionales	Valores
A	8.219
Pe	210.526
Sh	2.490
Ω	0.338
β	5×10^{-10}
β'	0
α	0.000105
ϑ	1.666
Φ^2	0.07790
σ	4284
δ	0.075
M	0.0389
X_m	0.4
K_D	0.00112
ε	0.34

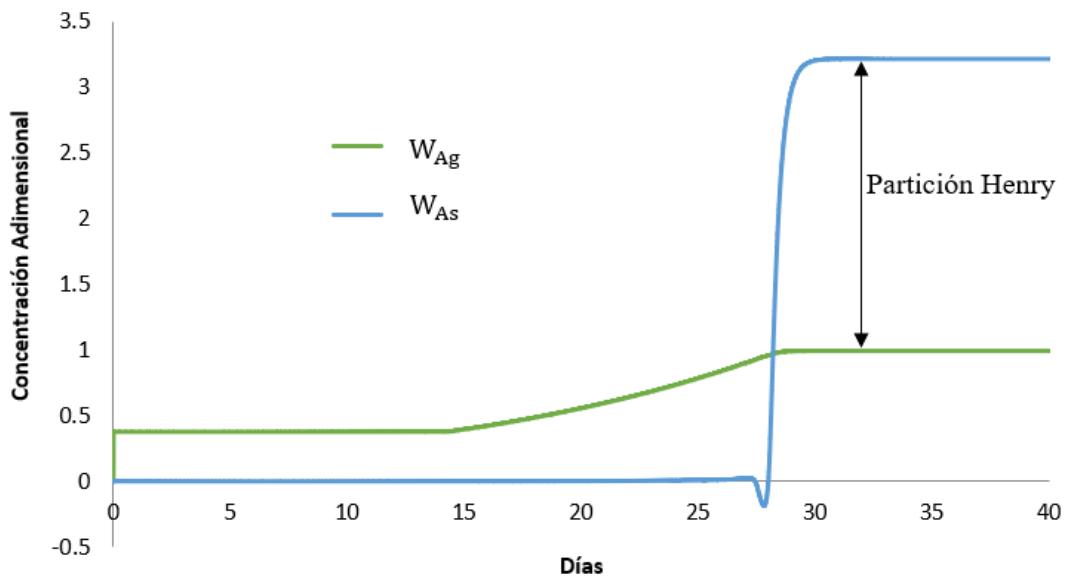
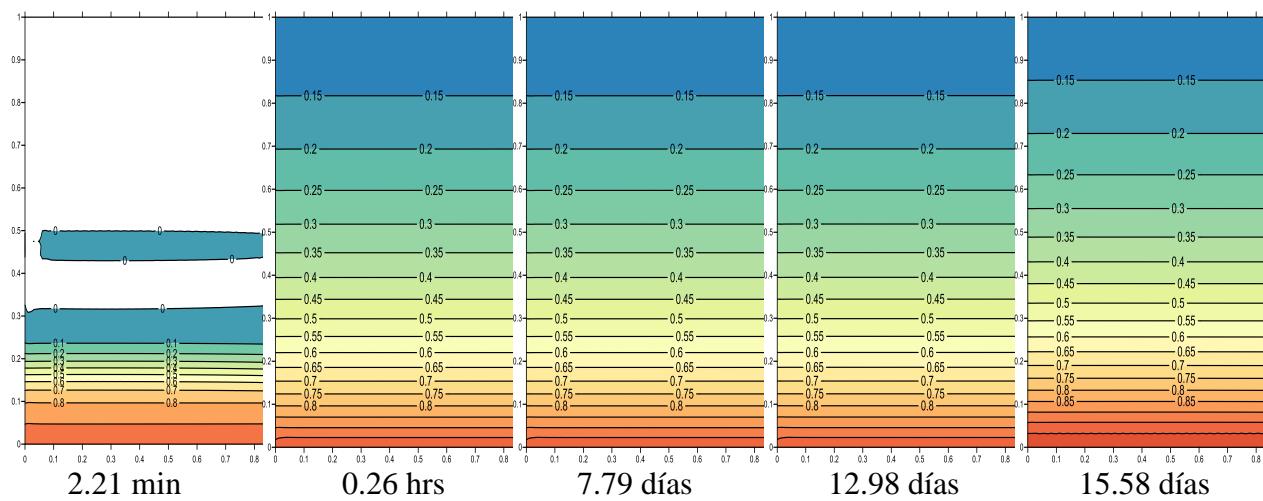


Figura 5. Cinética de concentraciones adimensionales de la especie A en el medio poroso y fase fluida, para $Sh=2.49$, $Pe=210.5$. El resto de los parámetros se muestran en la Tabla 4.



Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)

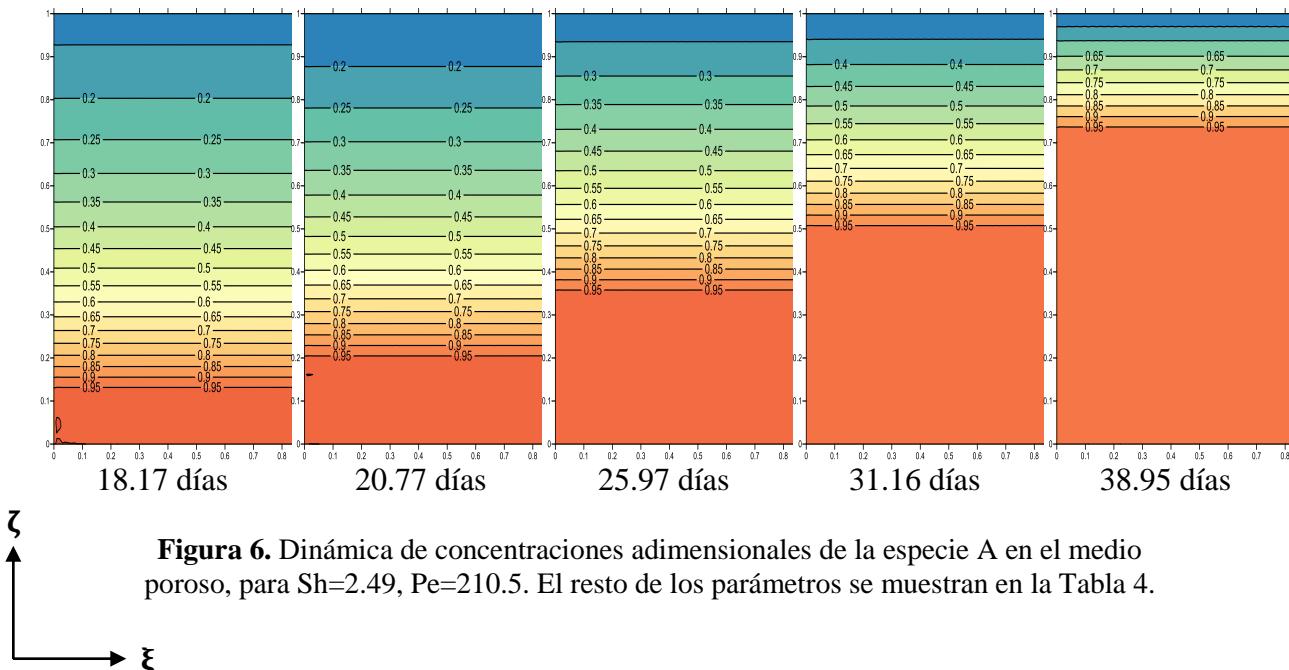


Figura 6. Dinámica de concentraciones adimensionales de la especie A en el medio poroso, para $Sh=2.49$, $Pe=210.5$. El resto de los parámetros se muestran en la Tabla 4.

En la Figura 6 se muestran las dinámicas de concentración del contaminante A en el medio poroso, para 40 días de operación. Se observa a partir del día 15 un aumento en la concentración a la salida del sistema, inicialmente se tiene una concentración menor de 0.15 adimensional equivalente a una eficiencia mayor al 85%, posteriormente al día 20 una concentración de 0.2 adimensional y a una eficiencia del 80% y en el día 31 una concentración de 0.4 adimensional a la salida representando solo el 60% de remoción en el sistema, lo cual concuerda con la cinética W_{Ag} mostrada en la Figura 5.

Eficiencia de remoción y condiciones hidrodinámicas

En cuanto a la dependencia de la eficiencia de remoción del biofiltro con respecto a las condiciones hidrodinámicas, la definición del número de Péclet obtenida en este trabajo puede relacionarse con su definición tradicional ($Pe = RePr$) y con la analogía adecuada, puede ser planteada para analizar la transferencia de masa ($Pe_m = ReSc$). Pe_m representa la interacción entre las características hidrodinámicas y la resistencia a la transferencia de masa en la capa límite en la interfase. En la Figura 7 se muestra el efecto del Pe_m sobre la curva de remoción de un biofiltro operando con las condiciones listadas en la Tabla 3.

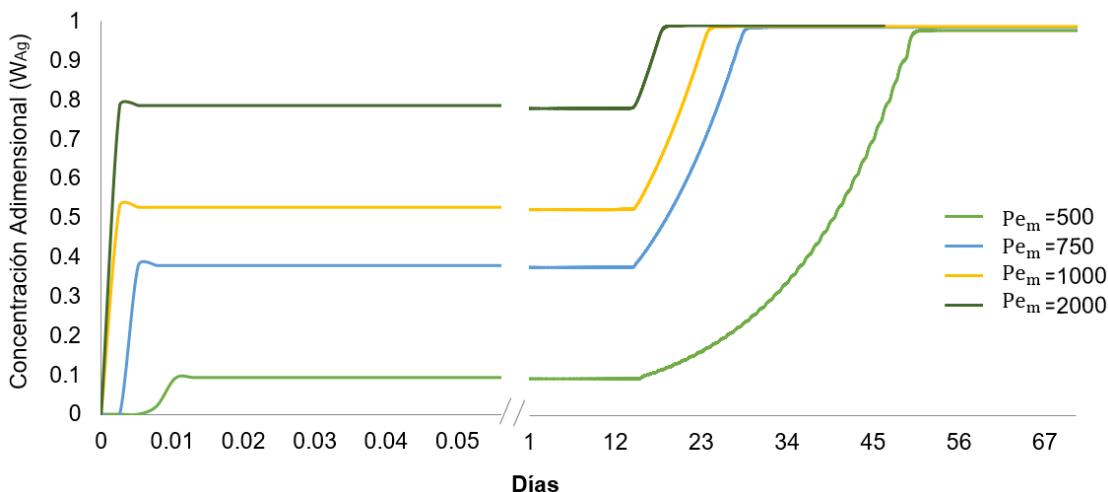


Figura 7. Cinética de concentración promedio adimensional en la salida del sistema de biofiltración en diversos números de Péclét (Pe_m).

Puede observarse (Figura 7) que Pe_m no tiene efecto sobre el tiempo de ruptura del biofiltro, aunque la eficiencia máxima de remoción si presenta una elevación inversamente proporcional con dicho número adimensional. En este contexto, algunos autores han propuesto que Pe_m no tiene efecto significativo sobre biofiltros de lecho fijo (Spigno *et al.*, 2004; Saltelli *et al.*, 2006; Silva *et al.*, 2012), sin embargo, estos estudios han sido realizados con un pequeño rango de variación del Pe_m (Saltelli *et al.*, 2006), o simplemente no reportados (Silva *et al.*, 2012). Debe tenerse presente que en sistemas donde el lecho eventualmente se saturará por completo, las condiciones hidrodinámicas pueden cambiar en gran medida (con respecto a la condición inicial), con lo que Pe_m puede variar algunos órdenes de magnitud (tal como se muestra en la Figura 7).

Modelos MDC2 y MDC3

En los modelos MDC2 y MDC3 se incluyó una estrategia de pseudo-localización de la biomasa en el biofiltro, con lo que los números Pe_m , Sh y aspecto geométrico A (Apéndice A), se convierten en funciones del tiempo. La Figura 8 muestra las simulaciones hechas para los datos de la Tabla 1 con los tres niveles de sofisticación de MDC.

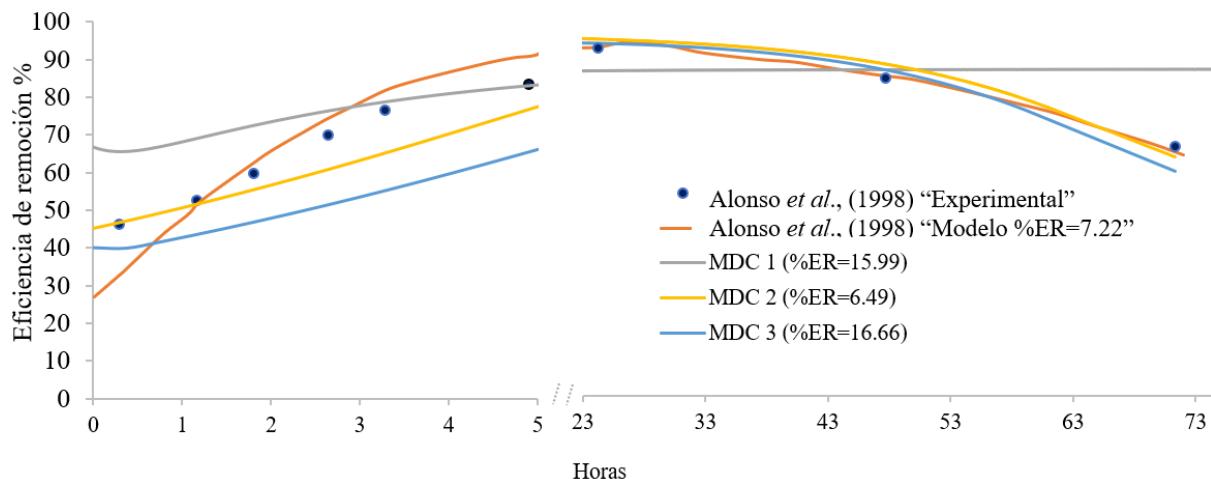


Figura 8. Comparación cuantitativa entre los tres niveles de sofisticación para MDC, el modelo y los datos experimentales de Alonso *et al.* (1998).

Puede observarse que el error relativo para MDC2 es aceptable ($<8\%$), encontrándose en el mismo orden de magnitud que otros modelos reportados (Alonso *et al.*, 1998), mientras que MDC1 manifiesta una tendencia claramente diferente (comportamiento asintótico reportado en la escala de tiempo mostrada en la gráfica) (Delay *et al.*, 2013). La eficiencia calculada ha sido teóricamente relacionada con el Pe_m , Nielsen *et al.* (2009) incluso han desarrollado una estrategia teórica para estimar el coeficiente de transferencia de masa interfacial (K_{ca}) que también se encuentra dentro de la definición del número de Sherwood empleado en este trabajo (ver Apéndice A). Los mismos autores reportan un diámetro de partícula muy similar al que ha sido considerado para los ductos hipotéticos que dan fundamento a los enfoques DCM1 y DCM2 (4 mm), encontrando eficiencias de remoción análogas a las que se determinaron con la ejecución de BIOFILF2 (máximo 93%).

Con respecto a la formación de zonas obstruidas y canales preferentes de flujo, a pesar de que MDC2 logra un error relativo menor a MDC3, este último es capaz de predecir un desarrollo diferencial de la biomasa en el reactor. En la Figura 9 se muestra una gráfica de la porosidad para algunos nodos del modelo discretizado (selección arbitraria) a lo largo del tiempo.

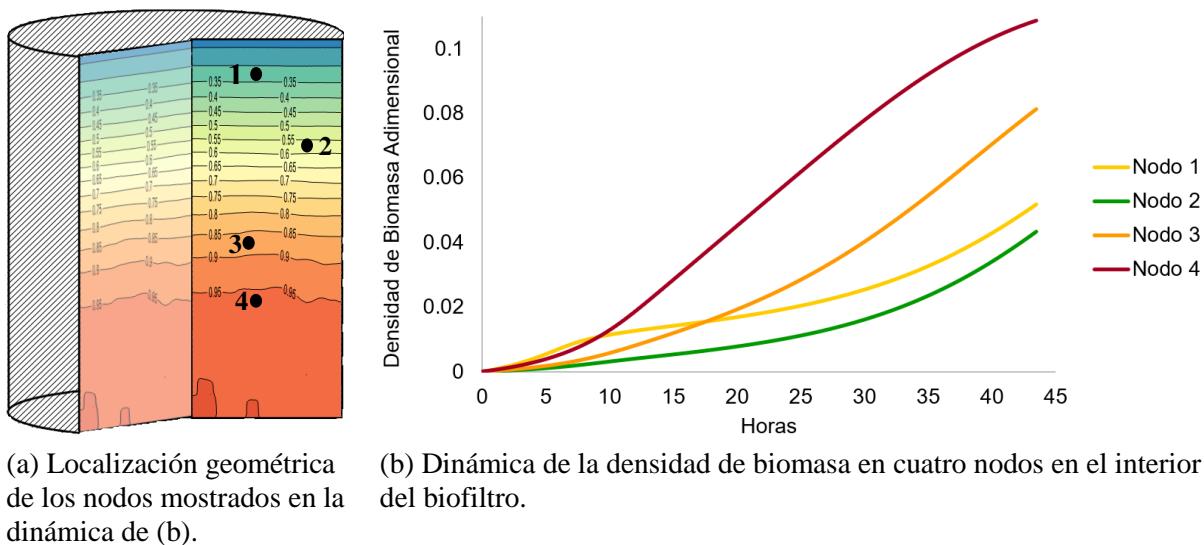


Figura 9. Seguimiento del desarrollo de la densidad de biomasa en el biofiltro simulado con MDC3.

El crecimiento puede observarse en el aumento de la densidad de biomasa adimensional. En la Figura 9a se muestra un diagrama de contornos 2-D en el que las zonas oscuras (tonalidades rojas) representan saturación total del espacio vacío en el biofiltro. Los nodos (1, 2, 3 y 4) son los puntos arbitrariamente seleccionados, graficados en 9b, donde se aprecia claramente la dinámica no lineal que cambia con el avance del tiempo, por citar un ejemplo; el nodo 1, que se encuentra expuesto a menores concentraciones de sustrato (antes de las 20 horas), presenta una densidad superior al nodo 4, sin embargo, aproximadamente a las 20 horas la tendencia se invierte, ya que las zonas cercanas a la entrada han sido saturadas y el tiempo de residencia (local) de la fase fluida disminuye, con lo que el sustrato no es removido y avanza hacia zonas cercanas a la salida del biofiltro. Ozis *et al.* (2007) han propuesto una estrategia estadística (percolación) bastante efectiva que logra resultados similares, mapeando en 2-D algunos lechos porosos con desarrollo de biomasa; no obstante, esta estrategia requiere abundante información característica del lecho (estudios de imágenes). En este sentido, uno de los argumentos más usuales para sostener el uso de modelos estadísticos se basa en la topología tridimensional muy compleja y no reproducible de un lecho típico de fermentación en estado sólido (Hasan *et al.*, 1998; Sahir *et al.*, 2007; Ozis *et al.*, 2007), por lo que, en MDC3, se incluyó la estrategia pseudo-aleatoria de distribución del inóculo empleada por Oliveros-Muñoz *et al.* (2017), conservando así la sencillez de los modelos tipo MDC,

pero sin realizar diversas simulaciones y promediar los resultados, demostrando validez estadística sin el empleo de los enfoques de percolación.

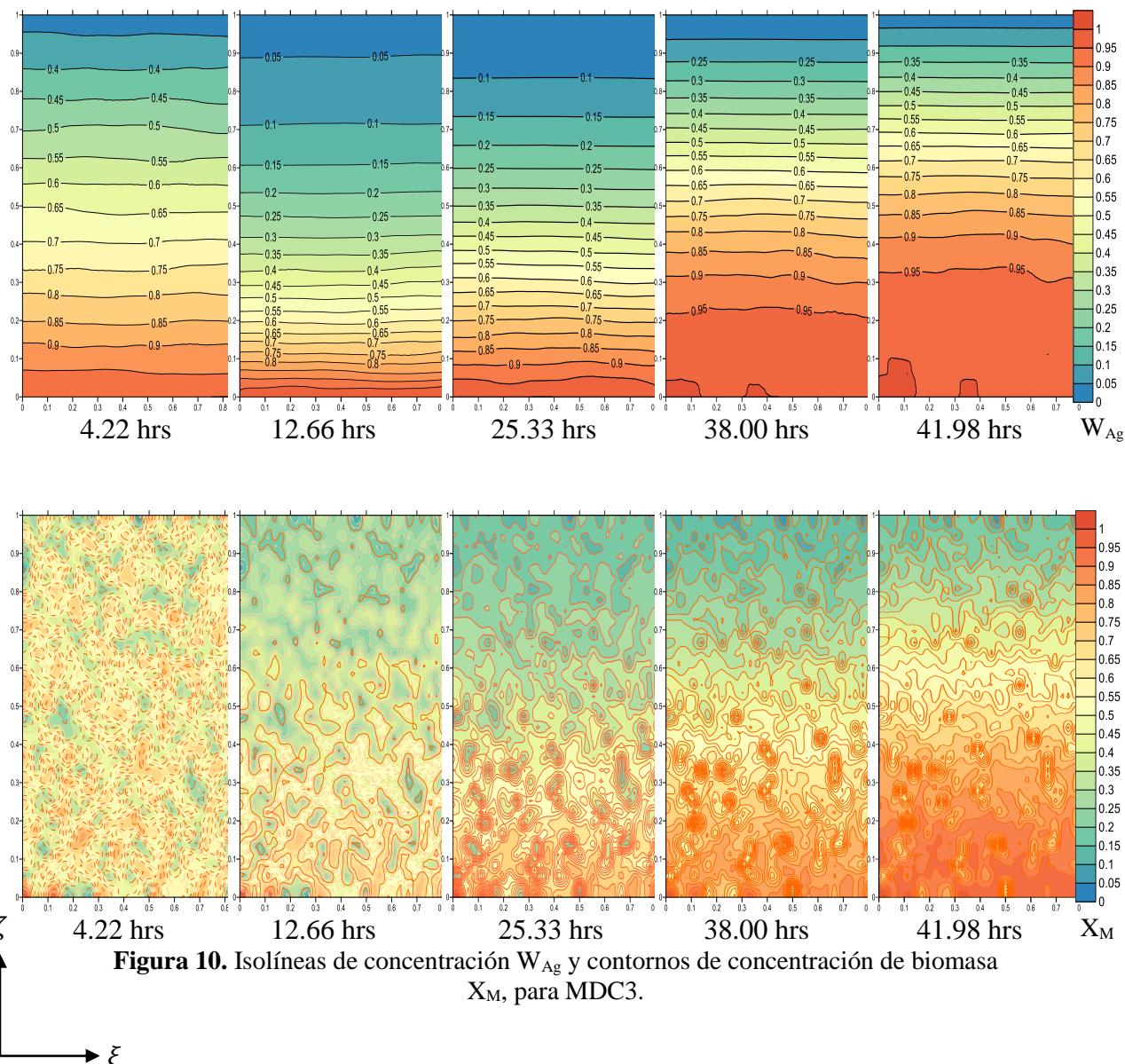


Figura 10. Isolíneas de concentración W_{Ag} y contornos de concentración de biomasa X_M , para MDC3.

La Figura 10 muestra el análisis de las isolíneas de concentración W_{Ag} y los contornos de biomasa X_M , se observa la distribución de la biomasa a lo largo del biofiltro para 41.98 hrs, resaltando a mayor acumulación de biomasa una disminución de eficiencia en el sistema. Por ejemplo, observando el panel de 38 hrs para X_M donde las zonas anaranjadas representan mayor concentración de biomasa en la parte inferior del sistema y con una eficiencia de remoción hasta un 75% aproximadamente.

Conclusión

En este trabajo fue presentado un estudio numérico de los números de Péclet (Pe) y Sherwood (Sh) en un modelo MDC (en tres niveles de sofisticación) aplicado a la biofiltración detolueno. Se demuestra que ambos números adimensionales tienen efecto sobre el comportamiento dinámico del sistema. Aunque Sh pareciera no tener un efecto significativo, como se ha reportado en literatura, al extender el tiempo de simulación y analizar el comportamiento de las variables dependientes fue posible concluir que los modelos MDC están intrínsecamente limitados por un rango de valores para los parámetros con los que operan, ya que, si los términos de consumo/producción compensan a los términos de entrada/salida, eventualmente ocurrirá una caída en la eficiencia del biofiltro. Este defecto numérico fue resuelto incluyendo la funcionalidad de Sh y Pe con respecto al espesor local de la biopelícula (desarrollándose en el interior de ductos cilíndricos hipotéticos que reemplazan conceptualmente al lecho poroso del biofiltro). Se predijo con un adecuado nivel de precisión (error relativo <8%, consistente con reportes de literatura) una curva de remoción experimental de tolueno. También se incluyó una estrategia pseudo-aleatoria de distribución del inóculo en el modelo propuesto, logrando predecir la aparición de zonas saturadas, que, aunque no modifican significativamente la eficiencia del biofiltro, si guardan suma importancia en procesos donde la formación de zonas anaerobias, por ejemplo, podría modificar el comportamiento microbiano. La estrategia desarrollada en este trabajo proporciona información más detallada de la fenomenología de la biofiltración al ser capaz de describir de forma global las velocidades de consumo y transporte y su relación con el desarrollo de la biomasa (MDC1) y la forma en que esta fue distribuida al inicio (MDC2).

El modelo presentado en el trabajo puede hacerse aún más robusto si se consideran más fenómenos involucrados en el proceso de biofiltración; sin embargo, es necesario seguir estudiando más esta tecnología para abordar muchos más enfoques que no fueron considerados, como la generación de calor metabólico, la humedad del sistema y mayor comprensión del soporte que conforma el medio poroso, entre muchos más parámetros de operación, cada uno con su importancia correspondiente en el impacto sobre la eficiencia de remoción. Hay que tener en mente que el incremento del nivel de sofisticación en el modelo requerirá mayor poder de cómputo. La intención del trabajo es presentar un modelo relativamente sencillo que permita predecir la curva de eficiencia de remoción en la biofiltración, que sirva como modelo base para ir incrementando el nivel de sofisticación según se requiera.

Los autores agradecen el soporte financiero del fondo SEP-CONACYT, México, a través de proyecto CB-2011-01-167095, así como al Tecnológico Nacional de México por el apoyo 5037.13-P.

Referencias

- Abumaizar, R.J., Smith, E.H., Kocher, W. (1997). Analytical model of dual-media biofilter for removal of organic air pollutants. *Journal of environmental engineering*. 123(6), 606-614. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(1997\)123:6\(606\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(1997)123:6(606))
- Aizpuru, A., Malhautier, L., Fanlo, J.L. (2002). Quantitative structure-activity relationship modeling of biofiltration removal. *Journal of environmental engineering*. 128(10), 953-959. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2002\)128:10\(953\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2002)128:10(953))
- April, T.M., Abbott, S.P., Foght, J.M., Currah, R.S. (1998). Degradation of hydrocarbons in crude oil by the ascomycete *Pseudallescheria boydii* (microascaceae). *Canadian Journal of Microbiology*. 44(3), 270-278. <https://doi.org/10.1139/w97-152>
- Alonso, C., Suidan, M.T., Kim, B.R., Kim, B.J. (1998). Dynamic mathematical model for the biodegradation of VOCs in a biofilter: biomass accumulation study. *Environmental science & technology*. 32(20), 3118-3123. DOI: 10.1021/es9711021
- Alonso, C., Zhu, X., Suidan, M.T., Kim, B.R., Kim, B.J. (2001). Mathematical model of biofiltration of VOCs: effect of nitrate concentration and backwashing. *Journal of environmental engineering*. 127(7), 655-664. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2001\)127:7\(655\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2001)127:7(655))
- Arellano-García, L., Dorado, A.D., Morales-Guadarrama, A., Sacristan, E., Gamisans, X., Revah, S. (2015). Modeling the effects of biomass accumulation on the performance of a biotrickling filter packed with PUF support for the alkaline biotreatment of dimethyl disulfide vapors in air. *Applied microbiology and biotechnology*, 99(1), 97-107. DOI 10.1007/s00253-014-5929-7
- Baquerizo, G., Maestre, J.P., Sakuma, T., Deshusses, M.A., Gamisans, X., Gabriel, D., Lafuente, J. (2005). A detailed model of a biofilter for ammonia removal: model parameters analysis and model validation. *Chemical Engineering Journal*. 113(2), 205-214. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2005.03.003>

- Bird, R.B. (2002). Transport phenomena. Applied Mechanics Reviews. 55(1), R1-R4. doi:10.1115/1.1424298
- Boraey, M.A., Guaily, A., Epstein, M. (2015). A hybrid model for biofilm growth on a deformable substratum. The Canadian Journal of Chemical Engineering. 93(5), 789-797. DOI: 10.1002/cjce.22172
- Bouchez, M., Blanchet, D., Vandecasteele, J.P. (1995). Degradation of polycyclic aromatic hydrocarbons by pure strains and by defined strain associations: inhibition phenomena and cometabolism. Applied Microbiology and Biotechnology. 43(1), 156-164. <https://link.springer.com/article/10.1007%2FBF00170638?LI=true>
- Calderón-Alvarado, M.P., Alvarado-Orozco, J.M., Herrera-Hernández, E.C., Martínez-González, G.M., Miranda-López, R., Jiménez-Islas, H. (2016). Effect of two viscosity models on lethality estimation in sterilization of liquid canned foods. Revista de Agroquímica y Tecnología de Alimentos, 22(6), 496-515. DOI: 10.1177/1082013215627393.
- Chen, J., Jiang, Y., Chen, J., Sha, H., Zhang, W. (2009). Dynamic model for nitric oxide removal by a rotating drum biofilter. Journal of hazardous materials. 168(2), 1047-1052. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2009.02.159>
- Delay, F., Porel, G., Chatelier, M. (2013). A dual flowing continuum approach to model denitrification experiments in porous media colonized by biofilms. Journal of contaminant hydrology. 150, 12-24. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2013.04.001>
- Deshusses, M.A., Hamer, G., Dunn, I.J. (1995). Behavior of biofilters for waste air biotreatment. I: Dynamic model development. Environmental Science & Technology. 29(4), 1048-1058. <http://cat.inist.fr/?aModele=afficheN&cpsidt=3601446>
- Devinny, J.S., Deshusses, M.A., Webster, T.S. (1998). Biofiltration for air pollution control. CRC press.
- Devinny, J.S., Ramesh, J. (2005). A phenomenological review of biofilter models. Chemical Engineering Journal. 113(2), 187-196. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2005.03.005>
- De Vahl Davis, G. (1983). Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. International Journal for numerical methods in fluids. 3(3), 249-264. DOI: 10.1002/fld.1650030305

Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)

- De Visscher, A., Van Cleemput, O. (2003). Simulation model for gas diffusion and methane oxidation in landfill cover soils. *Waste Management*. 23(7), 581-591.
[https://doi.org/10.1016/S0956-053X\(03\)00096-5](https://doi.org/10.1016/S0956-053X(03)00096-5)
- Duddu, R., Chopp, D.L., Moran, B. (2009). A two-dimensional continuum model of biofilm growth incorporating fluid flow and shear stress-based detachment. *Biotechnology and bioengineering*. 103(1), 92-104. DOI: 10.1002/bit.22233
- Eberl, H.J., Parker, D.F., Van Loosdrecht, M. (2001). A new deterministic spatio-temporal continuum model for biofilm development. *Computational and Mathematical Methods in Medicine*. 3(3), 161-175. <http://dx.doi.org/10.1080/10273660108833072>
- Friedman, A., Hu, B., Xue, C. (2014). On a multiphase multicomponent model of biofilm growth. *Archive for rational mechanics and analysis*. 211(1), 257-300
<https://link.springer.com/article/10.1007/s00205-013-0665-1>
- Gaudin, F., Andres, Y., Le Cloirec, P. (2005). Odorous emission biofiltration with new synthetic packing materials: essential nutrient release. <http://ruc.udc.es/dspace/handle/2183/11452>
- Golfier, F., Wood, B.D., Orgogozo, L., Quintard, M., Buès, M. (2009). Biofilms in porous media: development of macroscopic transport equations via volume averaging with closure for local mass equilibrium conditions. *Advances in water resources*. 32(3), 463-485.
<https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2008.11.012>
- Hao, Y., Fu, P., Carrigan, C.R. (2013). Application of a dual-continuum model for simulation of fluid flow and heat transfer in fractured geothermal reservoirs. In *Proceedings, 38th Workshop on Geothermal Reservoir Engineering*. Vol. SGP-TR-198. Stanford University, Stanford, California (pp. 462-469).
- Hartmans, S., Tramper, J. (1991). Dichloromethane removal from waste gases with a trickle-bed bioreactor. *Bioprocess and Biosystems Engineering*. 6(3), 83-92.
<https://link.springer.com/article/10.1007%2FBF00369060?LI=true>
- Hasan, S.D., Costa, J.A., Sanzo, A.V. (1998). Heat transfer simulation of solid state fermentation in a packed-bed bioreactor. *Biotechnology Techniques*. 12(10), 787-791.
<https://doi.org/10.1023/A:1008887828569>
- Hirai, M., Ohtake, M., Shoda, M. (1990). Removal kinetics of hydrogen sulfide, methanethiol and dimethyl sulfide by peat biofilters. *Journal of Fermentation and Bioengineering*. 70(5), 334-339. [https://doi.org/10.1016/0922-338X\(90\)90145-M](https://doi.org/10.1016/0922-338X(90)90145-M)

- Hodge, D.S., Devinny, J.S. (1994). Biofilter treatment of ethanol vapors. *Environmental Progress & Sustainable Energy*. 13(3), 167-173. DOI: 10.1002/ep.670130311
- Hodge, D.S., Devinny, J.S. (1995). Modeling removal of air contaminants by biofiltration. *Journal of Environmental Engineering*. 121(1), 21-32. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2004.02.007>
- Hwang, S.J., Tang, H.M. (1997). Kinetic behavior of the toluene biofiltration process. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 47(6), 664-673. <http://dx.doi.org/10.1080/10473289.1997.10463926>
- Iliuta, I., Larachi, F. (2004). Biomass accumulation and clogging in trickle-bed bioreactors. *AIChE journal*. 50(10), 2541-2551. DOI: 10.1002/aic.10201
- Jennings, P.A., Snoeyink, V.L., Chian, E.S.K. (1976). Theoretical model for a submerged biological filter. *Biotechnology and Bioengineering*. 18(9), 1249-1273. DOI: 10.1002/bit.260180906
- Jiménez-Islas, H., (1999). Modelamiento matemático de los procesos de transferencia de momentum, calor y masa en medios porosos. Tesis doctoral. Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa. CDMX, México.
- Jorio, H., Payre, G., Heitz, M. (2003). Mathematical modeling of gas-phase biofilter performance. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*. 78(7), 834-846. DOI: 10.1002/jctb.835
- Karrabi, M., Séchet, P., Morra, C., Cartellier, A., Geindreau, C., Martins, J. M. (2011). Investigation of hydrodynamic/biomass growth coupling in a pilot scale granular bioreactor at low pore Reynolds number. *Chemical engineering science*, 66(8), 1765-1782. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2011.01.010>
- Klapper, I., Dockery, J. (2010). Mathematical description of microbial biofilms. *Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM) review*. 52(2), 221-265. <https://doi.org/10.1137/080739720>
- Laspidou, C.S., Rittmann, B.E. (2004). Modeling the development of biofilm density including active bacteria, inert biomass, and extracellular polymeric substances. *Water Research*, 38(14-15), 3349-3361. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2004.04.037>
- Leson, G., Winter, A.M. (1991). Biofiltration: an innovative air pollution control technology for VOC emissions. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 41(8), 1045–1054. <http://dx.doi.org/10.1080/10473289.1991.10466898>

Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)

- Li, G.Q., Visscher, A.D. (2008). Toluene removal biofilter modeling. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 58(7), 947-956.
<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.3155/1047-3289.58.7.947>
- Liao, Q., Tian, X., Chen, R., Zhu, X. (2008). Mathematical model for gas–liquid two-phase flow and biodegradation of a low concentration volatile organic compound (VOC) in a trickling biofilter. *International Journal of Heat and Mass Transfer.* 51(7), 1780-1792.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.07.007>
- Malhautier, L., Khammar, N., Bayle, S., Fanlo, J.L. (2005). Biofiltration of volatile organic compounds. *Applied microbiology and biotechnology.* 68(1), 16-22.
<https://link.springer.com/article/10.1007/s00253-005-1960-z>
- Mysliwiec, M.J., VanderGheynst, J.S., Rashid, M.M., Schroeder, E.D. (2001). Dynamic volume-averaged model of heat and mass transport within a compost biofilter: I. Model development. *Biotechnology and bioengineering.* 73(4), 282-294. DOI: 10.1002/bit.1061
- Nielsen, P.H., Daims, H., Lemmer, H., Arslan-Alaton, I., Olmez-Hancı, T. (Eds.). (2009). FISH handbook for biological wastewater treatment. Iwa publishing. Identification and quantification of microorganisms in activated sludge and biofilms. 25–31.
- Oliveros-Muñoz, J.M., Calderón-Alvarado, M.P., Martínez-González, G.M., Navarrete-Bolaños, J.L., Jiménez-Islas, H. (2017). One-domain approach for studying multiphase transport phenomena in biofilm growing systems. *Biofouling,* 33(4), 336-351.
<http://dx.doi.org/10.1080/08927014.2017.1311326>
- Orgogozo, L., Golfier, F., Buès, M.A., Quintard, M., Koné, T. (2013). A dual-porosity theory for solute transport in biofilm-coated porous media. *Advances in water resources.* 62, 266-279.
<https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.09.011>
- Ottengraf, S.P.P. (1977). Theoretical model for a submerged biological filter. *Biotechnology and Bioengineering.* 19(9), 1411-1416. DOI: 10.1002/bit.260190914
- Ottengraf, S.P.P., Van Den Oever, A.H.C. (1983). Kinetics of organic compound removal from waste gases with a biological filter. *Biotechnology and Bioengineering.* 25(12), 3089-3102.
DOI: 10.1002/bit.260251222
- Ottengraf, S.P.P. (1986). Exhaust gas purification. In: *Biotechnology, a Comprehensive Treatise in 8 Volumes*, H.J. Rehm and G. Reed (Eds.), Weinheim: Verlag Chemie, Vol. 8, pp. 425 – 252.

- Ozis, F., Bina, A., Devinny, J.S. (2007). Biofilm growth-percolation models and channeling in biofilter clogging. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 57(8), 882-892.
<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.3155/1047-3289.57.8.882>
- Park, O.H., Jung, I.G. (2006). A model study based on experiments on toluene removal under high load condition in biofilters. *Biochemical engineering journal*. 28(3), 269-274.
<https://doi.org/10.1016/j.bej.2005.11.011>
- Piché, S., Grandjean, B.P., Larachi, F. (2002). Reconciliation procedure for gas – liquid interfacial area and mass-transfer coefficient in randomly packed towers. *Industrial & engineering chemistry research*. 41(19), 4911-4920. DOI: 10.1021/ie020094g
- Pruess, K., Narasimhan, T.N. (1982). A practical method for modeling fluid and heat flow in fractured porous media. <https://pubarchive.lbl.gov/islandora/object/ir%3A83149>
- Qasim, M., Shareefdeen, Z. (2013). Analysis of a recent biofilter model for toluene biodegradation. *Advances in Chemical Engineering and Science*. 3(01), 57. DOI:10.4236/aces.2013.31006
- Roache, P.J. (1972). *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa Publishers. Albuquerque, N. M., EUA.
- Sahir, A.H., Kumar, S., Kumar, S. (2007). Modelling of a packed bed solid-state fermentation bioreactor using the N-tanks in series approach. *Biochemical engineering journal*. 35(1), 20-28. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2006.12.016>
- Saltelli, A., Ratto, M., Tarantola, S., Campolongo, F. (2006). Sensitivity analysis practices: Strategies for model-based inference. *Reliability Engineering & System Safety*. 91(10), 1109-1125. <https://doi.org/10.1016/j.ress.2005.11.014>
- Serial, G.A., Smith, F.L., Suidan, M.T., Biswas, P., Brenner, R.C. (1995). Evaluation of trickle bed biofilter media for toluene removal. *Journal of the Air & Waste Management Association*. 45(10), 801-810. <http://dx.doi.org/10.1080/10473289.1995.10467410>
- Shareefdeen, Z., Baltzis, B.C. (1994a). Biofiltration of toluene vapor under steady-state and transient conditions: theory and experimental results. *Chemical Engineering Science*. 49(24), 4347-4360. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(05\)80026-0](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(05)80026-0)
- Shareefdeen, Z., Baltzis, B.C. (1994b). Biological removal of hydrophobic solvent vapors from airstreams. In Advances in bioprocess engineering. 397-404.
https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-94-017-0641-4_53

Análisis de transferencia de masa en modelos doble-continuos para biofiltración de compuestos orgánicos volátiles (COV)

- Shareefdeen, Z., Baltzis, B.C., Oh, Y.S., Bartha, R. (1993). Biofiltration of methanol vapor. *Biotechnology and Bioengineering*. 41(5), 512-524. DOI: 10.1002/bit.260410503
- Shareefdeen, Z., Shaikh, A.A., Ansar, Z. (1997). Development, experimental validation and dynamic analysis of a general transient biofilter model. *Chemical Engineering Science*, 52(5), 759-773. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(96\)00428-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(96)00428-9)
- Silva, J., Morales, M., Cáceres, M., Morales, P., Aroca, G. (2012). Modelling of the biofiltration of reduced sulphur compounds through biotrickling filters connected in series: Effect of H₂S. *Electronic Journal of Biotechnology*. 15(3), 7-7. DOI: 10.2225/vol15-issue3-fulltext-7
- Singh, R.S., Rai, B.N., & Upadhyay, S.N. (2010). Removal of toluene vapour from air stream using a biofilter packed with polyurethane foam. *Process Safety and Environmental Protection*, 88(5), 366-371. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2010.06.001>
- Spigno, G., Zilli, M., Nicolella, C. (2004). Mathematical modelling and simulation of phenol degradation in biofilters. *Biochemical Engineering Journal*. 19(3), 267-275. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2004.02.007>
- Van Bodegom, P. (2007). Microbial maintenance: a critical review on its quantification. *Microbial ecology*. 53(4), 513-523. <https://link.springer.com/article/10.1007/s00248-006-9049-5>
- Van Lith, C., David, S.L., Marsh, R. (1990). Design criteria for biofilters. In *Effluent Treatment and Waste Disposal*. Institution of Chemical Engineers. ClairTech, Utrecht, Rugby, UK, 127-132.
- Wani, A.H., Branson, R.M., Lau, A.K. (1997). Biofiltration: A promising and cost-effective control technology for Odors, VOCs and air toxics. *Journal of Environmental Science & Health Part A*. 32(7), 2027-2055. <http://dx.doi.org/10.1080/10934529709376664>
- Wongsuchoto, P., Charinpanitkul, T., Pavasant, P. (2003). Bubble size distribution and gas–liquid mass transfer in airlift contactors. *Chemical Engineering Journal*. 92(1), 81-90. [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(02\)00122-5](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(02)00122-5)
- Xi, J., Kang, I., Hu, H., Zhang, X. (2015). A biofilter model for simultaneous simulation of toluene removal and bed pressure drop under varied inlet loadings. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*. 9(3), 554-562. <https://link.springer.com/article/10.1007/s11783-014-0671-z>

- Yang, C.P., Chen, H., Zeng, G.M., Qu, W., Zhong, Y.Y., Zhu, X., Suidan, M.T. (2006). Modeling biodegradation of toluene in rotating drum biofilter. *Water science and technology*. 54(9). 137-144. DOI: 10.2166/wst.2006.860
- Zamir, S.M., Halladj, R., Nasernejad, B. (2011). Removal of toluene vapors using a fungal biofilter under intermittent loading. *Process safety and environmental protection*. 89(1), 8-14. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2010.10.001>

Nomenclatura

A	Aspecto geométrico, adimensional
A_{sf}	Área superficial de la interfase, m^{-1}
C_{Ag}	Concentración de la especie química A en la fase fluida, $kg\ m^{-3}$
C_{Ag}^e	Concentración de la especie química A en la fase fluida a la entrada, $kg\ m^{-3}$
C_{Ag}^0	Concentración de la especie química A en la fase fluida al inicio, $kg\ m^{-3}$
C_{As}	Concentración de la especie química A en el medio poroso, $kg\ m^{-3}$
C_{As}^{max}	Concentración máxima de la especie química A en el medio poroso, $kg\ m^{-3}$
C_{As}^0	Concentración de la especie química A en el medio poroso al inicio, $kg\ m^{-3}$
D_{Ag}	Difusividad de la especie química A en el gas, $m^2\ s^{-1}$
D_{eff}	Difusividad efectiva en la biopelícula, $m^2\ s^{-1}$
H	Constante de la Ley de Henry, adimensional
k_{Ca}	Coeficiente volumétrico de transferencia de masa, $m^{-1}\ s^{-1}$
k_C	Coeficiente convectivo de transferencia de masa, s^{-1}
k_d	Constante de muerte, s^{-1}
K_D	Constante de muerte adimensional, adimensional
k_s	Constante de saturación, $kg\ m^{-3}$
L	Longitud del sistema, m
L_f	Espesor hipotético de biopelícula, m
M	Mantenimiento celular adimensional, adimensional
m	Constante de mantenimiento celular, s^{-1}
Q	Flujo volumétrico, $m^3\ s^{-1}$
R	Radio, m

R_p	Radio de ductos cilíndricos, m
r	Coordenada radial
T_c	Temperatura, K
T_h	Temperatura, K
t	Tiempo, s
v_z	Velocidad axial promedio de la fase móvil, $m\ s^{-1}$
W_{Ag}	Concentración adimensional en la fase fluida, adimensional
W_{As}	Concentración adimensional en el medio poroso, adimensional
x	Coordenada x
X	Coordenada adimensional en dirección x
X_{bf}	Densidad de la biopelícula, $kg\ m^{-3}$
X_{max}	Densidad de biomasa máxima, $kg\ m^{-3}$
X_M	Densidad de biomasa en el biofiltro, $kg\ m^{-3}$
X_0	Densidad de biomasa inicial, $kg\ m^{-3}$
y	Coordenada en dirección y
Y	Coordenada adimensional en dirección y
$\frac{Y_x}{C_A}$	Rendimiento biomasa/sustrato, (kg de biomasa)/(kg de sustrato)
z	Coordenada en dirección z

Letras Griegas

α	Expresión adimensional razón de difusividades
β	Expresión adimensional concentración inicial de A en el gas, adimensional
β'	Expresión adimensional concentración inicial de A en la biopelícula, adimensional
δ	Inóculo adimensional, adimensional
ε	Porosidad, adimensional
ζ	Coordenada adimensional en dirección axial, adimensional
θ	Temperatura adimensional, adimensional
ϑ	Constante de saturación adimensional
Δn	Separación entre nodos en dirección normal
μ_{max}	Velocidad específica de crecimiento máxima, s^{-1}

ξ	Coordenada radial, adimensional
σ	Rendimiento de Biomasa/Sustrato adimensional, adimensional
Φ^2	Módulo de Thiele, adimensional
ψ	Función corriente, adimensional
ω	Vorticidad, adimensional
Ω	Concentración característica de A en la interfase gas – biopelícula, adimensional

Apéndice A

Definiciones adimensionales

$$Pe = \frac{v_z L}{D_{Ag}}$$

Número de Péclet

$$Pe_m = Re Sc$$

Número de Péclet masa

$$A = \frac{L}{R}$$

Aspecto geométrico

$$Sh = \frac{k_C a R^2}{D_{Ag}}$$

Número de Sherwood

$$\Omega = \frac{(C_{As}^{max} - C_{As}^0)}{(C_{Ag}^e - C_{Ag}^0)} H$$

Concentración característica de A en el gas – biopelícula

$$\beta = \frac{C_{Ag}^0}{(C_{Ag}^e - C_{Ag}^0)}$$

Concentración inicial de A en el gas adimensional

$$\beta' = \frac{C_{As}^0}{(C_{As}^{max} - C_{As}^0)}$$

Concentración inicial de A en la biopelícula adimensional

$$\phi^2 = \frac{\mu_{max} R^2}{D_{Ag}}$$

Módulo de Thiele

$$\vartheta = \frac{k_s}{(C_{As}^{max} - C_{As}^0)}$$

Constante de saturación adimensional

$$\sigma = \frac{(X_{max} - X_0)}{(C_{As}^{max} - C_{As}^0)} \frac{1}{Y}$$

Rendimiento de Biomasa/Sustrato adimensional

$$X_M = \frac{X_0}{X_{max}}$$

Desarrollo máximo de biomasa posible

$\delta = \frac{X_0}{(X_{\max} - X_0)}$	Densidad de Biomasa adimensional
$M = \frac{m(X_{\max} - X_0)R^2}{D_{Ag}(C_{As}^{\max} - C_{As}^0)}$	Constante adimensional de mantenimiento
$K_D = \frac{k_d R^2}{D_{Ag}}$	Constante de muerte adimensional
$\alpha = \frac{D_{eff}}{D_{Ag}}$	Razón de difusividades
$Sh = 2 + 0.57 Re^{0.5} Sc^{0.33}$	Número de Sherwood para fermentación en estado sólido
$Sc = \frac{v}{D} = \frac{\mu}{\rho D}$	Número de Smith
$Re = \frac{\rho v D}{\mu} = \frac{v D}{\nu}$	Número de Reynolds

Resumen de ecuaciones adimensionales

Balance microscópico de la especie química A en el medio poroso:

$$\frac{\partial W_{As}}{\partial F_o} = \alpha \left[\frac{\partial^2 W_{As}}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial W_{As}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 W_{As}}{\partial \zeta^2} \right] + \frac{Sh}{(1-\epsilon)} \left[\frac{1}{\Omega} [W_{Ag} + \beta] - [W_{As} + \beta'] \right] - \phi^2 \sigma [1 + [X_M - 1][W_X + \delta]] \frac{[W_{As} + \beta'][W_X + \delta]}{[\theta + W_{As} + \beta']} - M[W_X + \delta] \quad (9)$$

Donde

$$\begin{array}{ll} \text{C.F.1} & \frac{\partial W_{As}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0} = 0 \\ & \text{C.F.2} & \frac{\partial W_{As}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = 0 \\ \text{C.F.3} & \frac{\partial W_{As}}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=0} = 0 \\ & \text{C.F.4} & \frac{\partial W_{As}}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=1} = 0 \\ \text{C.I.} & W_{As}|_{F_o=0} = 0 \end{array}$$

Balance microscópico de la especie química A en la fase fluida:

$$\frac{\partial W_{Ag}}{\partial F_o} = \left[\frac{\partial^2 W_{Ag}}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial W_{Ag}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 W_{Ag}}{\partial \zeta^2} \right] - \frac{Pe}{A^2} \frac{\partial W_{Ag}}{\partial \zeta} - \frac{Sh}{\epsilon} \left[[W_{Ag} + \beta] - \Omega [W_{As} + \beta'] \right] \quad (10)$$

Donde:

$$\text{C.F.1} \quad \left. \frac{\partial W_{Ag}}{\partial \xi} \right|_{\xi=0} = 0 \quad \text{C.F.2} \quad \left. \frac{\partial W_{Ag}}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} = 0$$

$$\text{C.F.3} \quad W_{Ag} \Big|_{\zeta=0} = 1 \quad \text{C.F.4.} \quad \left. \frac{\partial W_{Ag}}{\partial \zeta} \right|_{\zeta=1} = 0$$

$$\text{C.I.} \quad W_{Ag} \Big|_{F_0=0} = 0$$

Balance de densidad de biomasa:

$$\frac{\partial W_X}{\partial F_0} = \phi^2 \frac{[W_{As} + \beta'][W_X + \delta]}{[\theta + W_{As} + \beta']} [1 + [X_M - 1][W_X + \delta]] - K_D[W_X + \delta] \quad (11)$$

Donde

$$\text{C.I.} \quad W_X \Big|_{F_0=0} = 0$$