

**DESARROLLO DE UN MODELO DE SIMULACIÓN Y PROYECCIÓN
DEL PROCESO DE BIOTRANSFORMACIÓN DE FENOL EN AGUAS
RESIDUALES INDUSTRIALES QUE PERMITA IDENTIFICAR
OPORTUNIDADES DE MEJORAMIENTO EN EL BIOPROCESO DE
REMOCIÓN DE FENOL DE LA REFINERÍA DE
BARRANCABERMEJA**

CRISÓSTOMO ALBERTO BARAJAS SOLANO



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA
BUCARAMANGA
2007**

**DESARROLLO DE UN MODELO DE SIMULACIÓN Y PROYECCIÓN
DEL PROCESO DE BIOTRANSFORMACIÓN DE FENOL EN AGUAS
RESIDUALES INDUSTRIALES QUE PERMITA IDENTIFICAR
OPORTUNIDADES DE MEJORAMIENTO EN EL BIOPROCESO DE
REMOCIÓN DE FENOL DE LA REFINERÍA DE
BARRANCABERMEJA**

CRISÓSTOMO ALBERTO BARAJAS SOLANO

**TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO DE SISTEMAS**

**DIRECTOR
RODRIGO GONZALO TORRES SAEZ
DR. EN BIO-QUIMICA
ESCUELA DE QUIMICA, UIS**

**CODIRECTOR:
ALFONSO MENDOZA CASTELLANOS
BACHELOR OF SCIENCE DEA
ESCUELA INGENIERÍA DE SISTEMAS, UIS**

**CODIRECTOR:
CRISTIAN BLANCO TIRADO
DR. EN QUÍMICA
ESCUELA DE QUÍMICA, UIS**



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA
BUCARAMANGA
2007**

A Dios,
quien ha guiado a mi camino

A mis padres,
Quienes creyeron en mí a pesar de mí mismo

Crisóstomo

AGRADECIMIENTOS

A los profesores Rodrigo Torres, Cristian Blanco y Alfonso Mendoza por la oportunidad de vincularme a este proyecto, y por su invaluable guía y apoyo.

A mi compañera Maria Angélica, Marian, por la confianza que depositó en mí como profesional, y como amigo.

A los compañeros del Centro de Investigación en Simulación y Control de Procesos, CISYC, por su apoyo y ayuda.

A mis amigos, por estar ahí cuando el siguiente paso no era siempre claro.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	14
1. PRESENTACIÓN DEL PROYECTO	16
1.1. OBJETIVOS	16
1.1.1. <i>Objetivo General</i>	16
1.1.2. <i>Objetivos Específicos</i>	16
1.2. PLANTEAMIENTO Y DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA	16
<i>Operación en Continuo</i>	18
1.3. SOLUCIÓN PROPUESTA:	21
2. MARCO TEÓRICO	22
2.1. TRATAMIENTOS BIOLÓGICOS	22
2.2. CRECIMIENTO BACTERIANO	23
2.2.1. <i>Estequiometría del crecimiento microbiano</i>	23
2.2.2. <i>Cinética de crecimiento</i>	24
2.2.3. <i>Curva de crecimiento</i>	25
2.3. FACTORES FÍSICOS Y QUÍMICOS QUE INFLUYEN EN EL CRECIMIENTO BACTERIANO	28
2.3.1. <i>Temperatura</i>	28
2.3.2. <i>pH</i>	28
2.4. BIOTRANSFORMACIÓN DE FENOL	29
2.5. TRANSFERENCIA DE O ₂	30
2.5.1. <i>Proceso de Reaireación]</i>	30
2.6. NOMENCLATURA	33
3. MODELO CINÉTICO	34
3.1. MODIFICADORES DEL MODELO CINÉTICO	35
3.1.1. <i>Inhibición por Amonio</i>	35
3.1.2. <i>Inhibición por Sulfuro</i>	36
3.1.3. <i>Efecto del Hidrocarburo</i>	36
3.1.4. <i>Efecto del pH</i>	36
3.2. INCLUSIÓN DE LA VARIACIÓN DEL PH EN EL FLUJO DE ENTRADA	37
3.3. RENDIMIENTOS	39
3.4. MUERTE CELULAR	40

4. METODOLOGÍA	41
4.1. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS PROTOTIPO	41
4.2. DATOS EXPERIMENTALES	43
4.3. MODELOS PROTOTIPO	43
4.3.1. <i>Primer Modelo: SimV1</i>	43
4.3.2. <i>Segundo Modelo: simV2</i>	46
4.3.3. <i>Tercer Modelo: simV3</i>	48
4.3.4. <i>Cuarto Modelo: simV4</i>	51
4.3.5. <i>Quinto Modelo: SimV5</i>	55
4.3.6. <i>Sexto Modelo: simV6</i>	58
4.3.7. <i>Séptimo Modelo: SimV7</i>	61
4.3.8. <i>Modelo Final: simV7b</i>	64
5. MODELO MATEMÁTICO FINAL	65
5.1. VELOCIDAD ESPECÍFICA DE CRECIMIENTO: MODELO CINETICO	65
5.1.1. <i>Multiplicador de pH: $p(pH)$</i>	65
5.1.2. <i>Modelo de Oxígeno</i>	66
5.1.3. <i>Inhibición Competitiva</i>	66
5.2. BALANCE DE BIOMASA	66
5.3. BALANCE DE FENOL	67
5.4. BALANCE DE AMONIO	68
5.5. BALANCE DE SULFURO	69
5.6. BALANCE DE OXÍGENO	70
5.7. BALANCE DE HIDROGENIONES	72
5.8. ANALISIS DE SENSIBILIDAD	73
5.8.1. <i>Estabilidad Numérica</i>	73
5.8.2. <i>Constante de Inhibición del Fenol (Kf)</i>	73
5.8.3. <i>Constante de Saturación del Fenol (Ks)</i>	74
5.8.4. <i>Velocidad Máxima de Crecimiento (μ_{max})</i>	74
5.8.5. <i>Constante de Transferencia de Masa (kLa)</i>	75
5.8.6. <i>Concentración de Saturación de Oxígeno en el Agua (C)</i>	75
5.8.7. <i>Rendimiento de la Biomasa con Respecto al Oxígeno ($Y_{x/o}$)</i>	76
5.9. RESULTADOS Y CONCLUSIONES	77
6. APLICACIÓN SOFTWARE	79
6.1. PRIMERA APROXIMACIÓN DE LA INTERFACE	79
6.2. INTERFACE FINAL	80

6.2.1. Lenguaje de Programación Escogido	81
6.2.2. Gráficas y Presentación de Resultados	81
6.2.3. Variables de Diseño y Modelo Cinético	81
6.2.4. Escenarios Reales	82
6.2.5. Compatibilidad Con Microsoft Excel	82
6.3. DIAGRAMA DE CASOS DE USO	83
6.4. VENTANAS DE LA APLICACION	83
6.4.1. Ventana de Inicio	83
6.4.2. Ventana de Escenario	84
6.4.3. Ventana de Diseño de Bio-reactor	85
6.4.4. Ventana de Modelo Cinético	86
6.4.5. Ventana de Valores de Entrada/Salida	87
6.4.6. Ventana de Gráficos de Simulación por Lote	87
6.4.7. Ventana de Grafico de Simulación Pausada	90
REFERENCIA BIBLIOGRÁFICA	91
ANEXOS	96

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Ventajas y desventajas de los procesos aerobios y anaerobios	22
Tabla 2. Valores típicos de F	31
Tabla 3. Otras ecuaciones comunes para determinar K_2	32
Tabla 4: Relación de los parámetros cinéticos	35
Tabla 5. Caracterización iónica aguas	37
Tabla 6. Relación de los rendimientos utilizados experimentales	39
Tabla 7: Prototipo SimV1	44
Tabla 8: Prototipo SimV2	46
Tabla 9: Prototipo SimV3 en <i>batch</i>	49
Tabla 10: Prototipo SimV3 en continuo	50
Tabla 11: Prototipo SimV4 en <i>batch</i>	52
Tabla 12: Prototipo SimV4 en continuo	53
Tabla 13: Prototipo SimV5	55
Tabla 14: Prototipo SimV6	58
Tabla 15: Prototipo SimV7	61

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Esquema general de la unidad.	18
Figura 2. Corrida en continuo $T_r = 30$ horas.	19
Figura 3. Corrida en continuo $T_r = 24$ horas.	19
Figura 4. Corrida en continuo $T_r = 18$ horas	19
Figura 5. Corrida en continuo $T_r = 18$ h (con limitación de O_2)	20
Figura 5. Curva típica del crecimiento bacteriano.	26
Figura 6. Efecto del pH sobre μ_M . Curva a) Hongos b) Bacterias.	29
Figura 7. Efecto de la temperatura sobre μ_M para un microorganismo mesófilo	29
Figura 8. Ruta típica de metabolización de Fenol	29
Figura 9. Efecto inhibitorio del fenol sobre la biomasa	35
Figura 10. Velocidad específica de crecimiento en función del pH	36
Figura 11. Comportamiento celular durante la corrida	40
Figura 12. Modelo SimV1 (<i>Batch</i>)	44
Figura 13. Modelo SimV1 (Continuo)	45
Figura 14. Simulación <i>batch</i> /continuo con un modelo cinético Monod	45
Figura 15. Simulación <i>batch</i> /continuo con un modelo cinético Haldane	46
Figura 16. Modelo SimV2	47
Figura 17. Simulación con 40 ppm de amonio en el afluente.	47
Figura 18. Simulación con 100 ppm de amonio en el afluente.	48
Figura 19. Modelo SimV3 en <i>batch</i>	49
Figura 20. Modelo SimV3 en continuo	50
Figura 21. Comparación del modelo con y sin el efecto inhibitorio del sulfuro (40 ppm)	51
Figura 22. Modelo SimV4 en <i>batch</i>	52
Figura 23. Modelo SimV4 en continuo	53
Figura 24. Simulación con el limitante de oxígeno disuelto	54
Figura 25. Perfil de oxígeno disuelto durante la simulación	54
Figura 26. Modelo SimV5	56
Figura 27. Simulación con limitante de inyección de aire ($645 \text{ m}^3/\text{h}$)	57
Figura 28. Perfil de oxígeno disuelto	57

Figura 29. Modelo SimV6	59
Figura 30. Simulación con limitante de pH	60
Figura 31. Perfil de pH. pH inicial = 7. pH del afluente = 8	60
Figura 32. Modelo SimV7	63
Figura 33. Simulación con un pH del afluente calculado en 10,292	63
Figura 34. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar Kf	74
Figura 35. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar Ks	74
Figura 36. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar um	75
Figura 37. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar kLa	75
Figura 38. Niveles de fenol, biomasa y oxígeno respectivamente al variar C	76
Figura 39. Niveles de fenol, biomasa y oxígeno respectivamente al variar $Y_{x/O}$	77
Figura 40. Primera aproximación de la interface en MatLAB	80
Figura 41. Diagrama de casos de uso	83
Figura 42. Ventana de inicio	84
Figura 43. Ventana de escenario de simulación	84
Figura 44. Ventana de diseño de bio-reactor	85
Figura 4. Ventana de modelo cinético	86
Figura 46. Ventana de valores de entrada/salida	87
Figura 47. Perfiles de fenol y biomasa en una simulación por lotes	88
Figura 48. Perfiles de oxígeno y pH en una simulación por lotes	88
Figura 49. Tabla de datos en una simulación por lotes	89
Figura 50. Resumen del escenario en una simulación por lotes	89
Figura 51. Perfiles de las variables en una simulación pausada	90

LISTA DE ANEXOS

Anexo A: Archivos Utilizados por la Aplicación	96
Anexo B: Requisitos del Sistema	98

RESUMEN

TITULO: DESARROLLO DE UN MODELO DE SIMULACIÓN Y PROYECCIÓN DEL PROCESO DE BIOTRANSFORMACIÓN DE FENOL EN AGUAS RESIDUALES INDUSTRIALES QUE PERMITA IDENTIFICAR OPORTUNIDADES DE MEJORAMIENTO EN EL BIOPROCESO DE REMOCIÓN DE FENOL DE LA REFINERÍA DE BARRANCABERMEJA*

AUTOR:
CRISÓSTOMO ALBERTO BARAJAS SOLANO**

PALABRAS CLAVE:
Biodegradación, Fenol, Simulación Numérica, Haldane.

RESUMEN

En el presente trabajo se plantea el modelo matemático del proceso de tratamiento continuo de aguas residuales industriales de una de las refinerías de ECOPETROL, localizada en la ciudad de Barrancabermeja, GCB. El agua residual, con compuestos fenólicos provenientes de los diferentes efluentes de procesos es sometida a un proceso de tratamiento biológico utilizando un consorcio microbiano. En el modelo matemático se incluyen las variables más importantes involucradas en el proceso de biodegradación del fenol. Para la cinética de crecimiento celular se utilizó la ecuación de Haldane, al cual se le incluyen los efectos de pH, temperatura y la presencia de sustancias que afectan la biotransformación. El proceso se simuló mediante ecuaciones diferenciales ordinarias simultáneas resueltas mediante métodos numéricos por diferencias finitas hacia la derecha utilizando MATLAB 6.5 Release 13.

Los resultados obtenidos describen de manera acertada el comportamiento del proceso industrial.

Para efectos de la entrega al usuario final, se desarrolló una interface gráfica basada en múltiples documentos, MDI, de acuerdo con las especificaciones y requisitos presentados por el personal del ICP-ECOPETROL. El lenguaje de programación utilizado es Microsoft Visual C# .NET 2003 y la herramienta Steema TeeChart.Lite v2 como recurso para presentar los resultados de la simulación de forma gráfica.

Este trabajo se enmarca dentro de la primera etapa de desarrollo del convenio UIS-ICP.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ingenierías Físico Mecánicas. Escuela de Ingeniería de Sistemas. Director: Rodrigo Gonzalo Torres Saez. Codirectores: Alfonso Mendoza Castellanos, Cristian Blanco Tirado.

ABSTRACT

TITULO: DEVELOPMENT OF A MATHEMATICAL AND SIMULATION MODEL OF THE PHENOL BIOTRANSFORMATION PROCESS IN INDUSTRIAL WASTEWATERS WHICH ALLOS TO IDENTIFY IMPROVING OPPORTUNITIES IN THE PHENOL REMOTION PROCESS IN THE BARRANCABERMEJA REFINERY*

AUTHOR:
CRISÓSTOMO ALBERTO BARAJAS SOLANO**

PALABRAS CLAVE:
Biodegradation, Phenol, Numeric Simulation, Haldane.

RESUMEN

In this work it is planted the mathematical model for the continuum treatment process for industrial wastewaters in one of the ECOPETROL refineries, located in the city of Barrancabermeja, GCB. The wastewaters, with phenolic compounds incoming from the different process effluents are put under a biological treatment using a microbial consortium. In the mathematical model are included the most important variables involved in the phenol biodegradation process. For the cell growing kinetics it was used the Haldane Equation, which includes the effects for pH, temperature and the presence of different substances which affect the biotransformation. The process was simulated using ordinal simultaneous differential equations solved by means of feed-forward finite differences numerical methods using MATLAB 6.5 Release 13.

The results obtained describe in an accurate way the behavior of the industrial process.

Taking in care the final user, it was developed a graphic interface based in multiple documents, MDI, in agreement with the specifications and requirements presented by the ICP-ECOPETROL personnel. The programming language used is Microsoft Visual C# .NET 2003 and the tool Steema TeeChart.Lite v2 as a resource used to present the simulation results in a graphic way.

This degree work is framed in the first stage of the UIS-ICP agreement.

* Degree Work

** Physical-Mechanical Engineering Faculty. System Engineering Department. Director: Rodrigo Gonzalo Torres Saez. Co directors: Alfonso Mendoza Castellanos, Cristian Blanco Tirado.

INTRODUCCIÓN

La investigación y la generación de conocimiento siempre han sido los objetivos primordiales de la academia universitaria. Por ello, la Universidad Industrial de Santander se ha destacado en la región, en el país y en el exterior por su espíritu investigativo y modificador del estado del arte, filosofía dentro de la cual se enmarca este proyecto.

Dentro de una UIS investigativa, la carrera de Ingeniería de Sistemas ha planteado un enfoque indagador hacia las ciencias en su programa de pregrado. Los estudiantes generan habilidades matemáticas y de razonamiento durante el desarrollo de su carrera, para poder así entender y comprender fenómenos físicos, químicos, biológicos, sociales, entre otros. Esto sumado con años de interacción con estudiantes de diferentes carreras, le brinda al ingeniero de sistemas un perfil interdisciplinario, capaz de ser parte en grupos de investigación y desarrollo en casi cualquier área de las ciencias, ya sea desempeñando un rol de apoyo o de dirección.

Este perfil profesional es ampliamente apetecido en el ambiente profesional, colocando a los estudiantes de Ingeniería de Sistemas entre los preferidos para conformar grupos de investigación y semilleros de empresas en la línea de la investigación. Es este el perfil que se desarrolla en este trabajo de grado.

La biodegradación de fenol es un fenómeno bioquímico que se ve afectado por múltiples variables: inhibiciones competitivas en la biomasa provocadas por la presencia de diferentes compuestos en el medio acuoso; sensibilidad de la biomasa a las alteraciones del pH del medio acuoso; dependencia crítica del oxígeno debido a la naturaleza aerobia de la biomasa. Entre otros fenómenos responsables de limitar y/o modificar el proceso a escala industrial.

Es en situaciones como estas en las que las herramientas de simulación, métodos de solución numérica convencionales, e incluso métodos no-convencionales como Redes Neuronales Artificiales, se hacen necesarios para poder comprender y resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales simultáneas que describen el comportamiento de la biomasa estudiada.

A causa de esta complejidad matemática, el rol desempeñado como ingeniero de sistemas fue el de apoyo científico al proceso de desarrollo de los modelos matemáticos que describen el proceso de biodegradación de fenol y, la posterior solución numérica de los modelos matemáticos resultantes, utilizando incluso métodos de solución no-convencionales cuando la complejidad del fenómeno lo ameritaba.

Enfocado en la proyección al usuario final que habrá de hacer uso de esta herramienta matemática, se explotó también el perfil de ingeniero como diseñador y programador de interfaces cliente, para que el usuario cuente con una herramienta robusta, inteligente y didáctica que facilite la comprensión y el análisis del fenómeno.

Este proyecto se enmarca dentro del primer año del convenio entre la Universidad Industrial de Santander, UIS, y el Instituto Colombiano de Petróleo, ICP-ECOPETROL, cuyo fin es generar el modelo matemático que describe el comportamiento de la biodegradación de fenol en condiciones industriales, en el que se encuentran vinculadas las escuelas de Ingeniería de Sistemas y la Escuela de Química.

Los equipos de trabajo interdisciplinarios cuentan con la fortaleza que brindan diferentes enfoques profesionales y científicos, al igual que con una gran variedad de modelos mentales y de paradigmas, dando toda esta suma como resultado un talento humano altamente capacitado y, con la flexibilidad para responder a retos científicos en tiempos relativamente cortos, con resultados satisfactorios que pueden y deben, mejorar nuestra comprensión del mundo que nos rodea.

1. PRESENTACIÓN DEL PROYECTO

1.1. OBJETIVOS

1.1.1. Objetivo General

Desarrollar un modelo de simulación y proyección del proceso de biotransformación de fenol en aguas residuales industriales que permita validar los modelos cinéticos propuestos por el equipo de investigación, y que además sirva como herramienta para la toma de decisiones al momento de ser aplicado en campo.

1.1.2. Objetivos Específicos

- Desarrollar una herramienta software que permita validar los modelos cinéticos propuestos para el proceso de biotransformación del fenol y otros compuestos industriales.
- Diseñar y colocar en marcha una herramienta de simulación que permita evaluar diferentes escenarios de los procesos de biodegradación de fenol y otros compuestos industriales en aguas residuales, como fundamento para la toma de decisiones.
- Crear una interface gráfica, amigable, transportable y expansible que maximice la utilidad del modelo de simulación y predicción.

1.2. PLANTEAMIENTO Y DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

El aumento de los residuos contaminantes y sustancias tóxicas liberados en las aguas residuales de las industrias petroquímicas producen efectos nocivos en el medio ambiente. Las aguas residuales provenientes de los procesos de refinación de petróleo pueden contener compuestos fenólicos, los cuales por su toxicidad generan problemas en los ecosistemas; por lo tanto, estas aguas deben ser tratadas antes de vertirse a los cuerpos de agua receptores. [8, 38, 49-50, 57]

Algunos métodos conocidos para el tratamiento de estos residuos incluyen métodos químicos y biológicos, tales como biodegradación, adsorción con carbón activado, adsorción con resinas, oxidación química, oxidación catalítica, extracción con solventes, foto-oxidación catalítica, extracción e incineración, entre otros [46-50]. El tratamiento de estos compuestos orgánicos implica por lo general, tratamiento biológico, donde un grupo de microorganismos previamente seleccionados y bajo condiciones adecuadas logra biodegradar estos compuestos.

Para ello, ECOPETROL a través del Instituto Colombiano del Petróleo (ICP) desarrolló un proceso biológico para el tratamiento de las aguas residuales de la industria del petróleo, el cual utiliza un consorcio bacteriano altamente especializado en la biotransformación de compuestos fenólicos. Este proceso se usa a nivel industrial actualmente.

La biodegradación de fenol ha sido ampliamente estudiada, y se ha encontrado que existen grupos de bacterias capaces de adaptarse y de degradar el fenol contenido en diversos sistemas [12, 25-26, 61-66], disminuyendo notablemente su concentración. Adicionalmente se ha encontrado que las bacterias aeróbicas son las más adecuadas para degradar compuestos aromáticos, siendo el fenol uno de los compuestos más comunes en estudios como principal fuente de carbono y energía. La familia de *Pseudomonas* se encuentra entre los organismos comúnmente más utilizados para el estudio de la biodegradación de fenol.

Para describir la biodegradación del fenol es necesario evaluar la relación entre la velocidad específica de crecimiento de la biomasa y la concentración de fenol, teniendo en cuenta que el proceso es inhibido por el mismo fenol luego de cierta concentración de sustrato. La ecuación de Haldane es la más usada frecuentemente para describir su degradación en un amplio rango de concentración inicial de fenol. [4, 12, 25, 27, 33, 61-66]

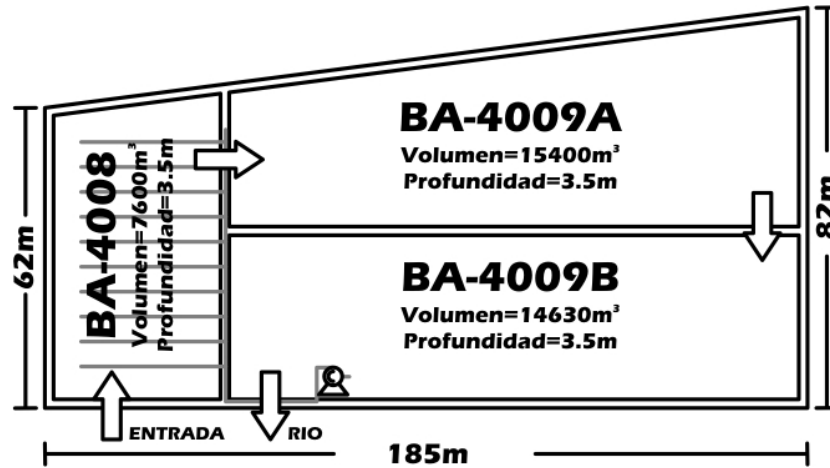
El conocimiento de la cinética que rige al proceso es necesario para poder controlarlo, y así aumentar la eficiencia de remoción del fenol. Por esta razón, el modelamiento y simulación de estos procesos es una de las herramientas más utilizadas hoy en día para predecir el comportamiento del sistema mediante un modelo matemático, el cual ayudará a establecer las condiciones de operación para un mejor desempeño experimental.

El escenario de biodegradación a estudiar es la *Planta de Tratamiento de Aguas Residuales*, PTAR, localizada en la *Gerencia Complejo Barranca* de ECOPETROL, GCB.

La PTAR GCB consta de un (1) bio-reactor con tres (3) etapas en serie, alimentadas con el agua residual de los procesos industriales propios de las actividades de la refinería, la cual cuenta con concentraciones nocivas de compuestos fenólicos que se esperan sean biodegradados con un alto grado de eficiencia en la primera etapa.

Las capacidades volumétricas de cada una de las 3 etapas en serie son 7600, 15400 y 14630 m³ respectivamente.

Figura 1. Esquema general de la unidad.



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB, ECOPETROL.

El tratamiento biológico para la biodegradación de fenol es un proceso aerobio por lo que la PTAR cuenta con un sistema de aireación por inyección solo en la primera etapa del bio-reactor.

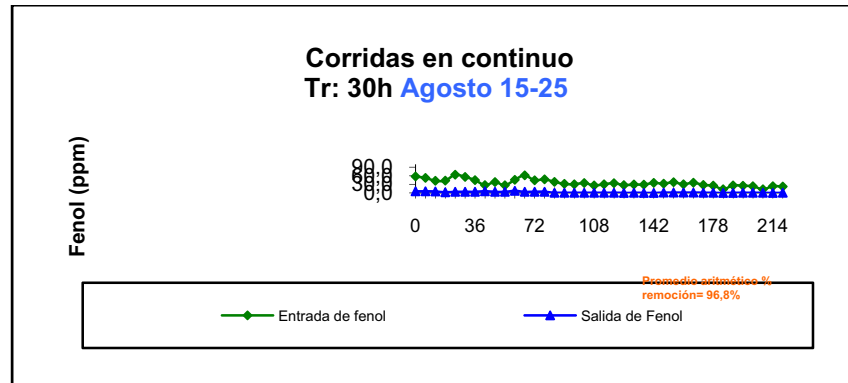
El sistema de inyección de aire se realiza en el flujo de recirculación, el cual es de tipo interno. Se recircula parte del flujo de entrada a través de un sistema de bomba de aire y boquillas inyectoras, inyectándole aire atmosférico antes de ser llevado de nuevo al bio-reactor por medio de un sistema de boquillas difusoras localizadas en el fondo de éste.

Operación en Continuo

Dentro de los estudios previos a este proyecto se realizaron en condiciones de planta piloto corridas en continuo ($V_{trabajo}=120000$ L) a 3 diferentes flujos volumétricos de afluente, los cuales conllevan 3 tiempos de residencia a estudiar: 18, 24 y 30 horas. El proceso fue monitoreado con mediciones cada 12 horas de concentración de fenol, microorganismos, oxígeno disuelto (O.D.) y pH a la entrada, en el interior del bio-reactor y a la salida de la unidad.

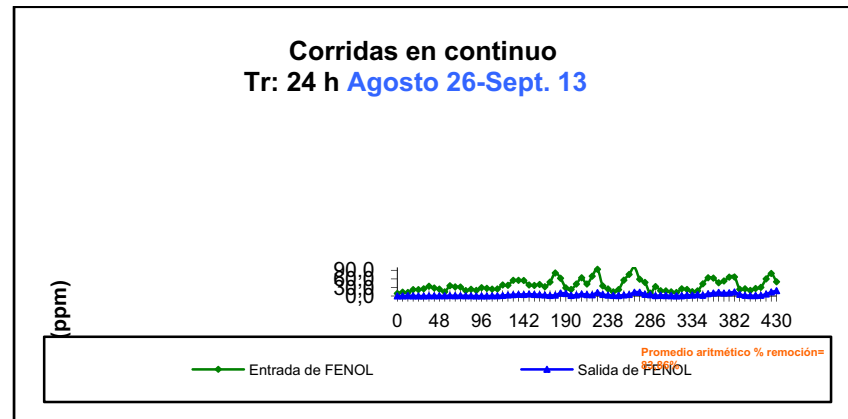
A continuación, en las siguientes curvas se puede observar el comportamiento a la entrada y salida de fenol con el tiempo para las diferentes condiciones de estudio. La corrida se inicio con un tiempo de residencia de 30 horas (Figura 1), y luego de ciertos días de monitoreo se aumentó el flujo de entrada para alcanzar un tiempo de residencia de 24 horas (Figura 2) y posteriormente de 18 horas (Figura 3). Con este último tiempo de residencia, se realizó una corrida adicional sin presencia de oxígeno (Figura 4) con el fin determinar experimentalmente la importancia del oxígeno como variable del proceso.

Figura 2. Corrida en continuo Tr =30 horas.



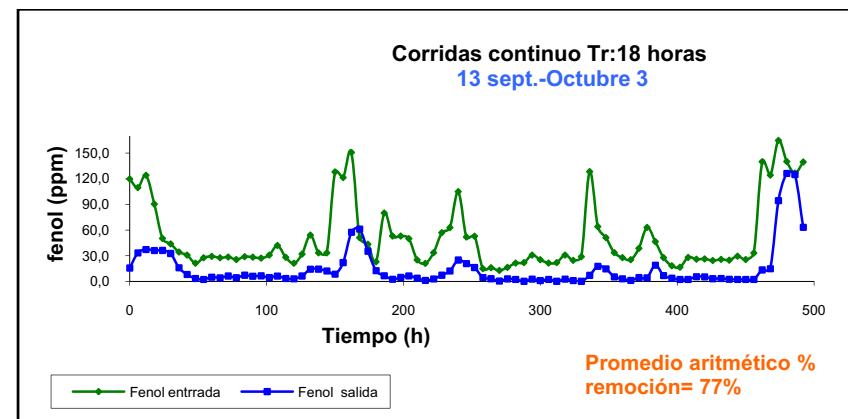
Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB, ECOPETROL.

Figura 3. Corrida en continuo Tr =24 horas.



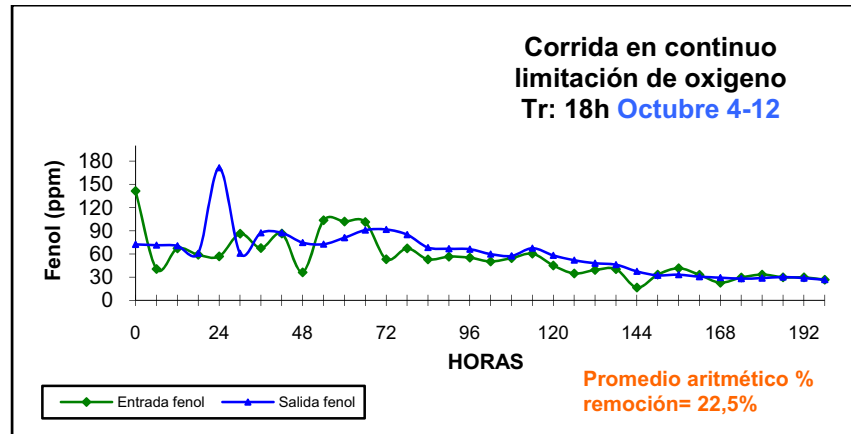
Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB, ECOPETROL.

Figura 4. Corrida en continuo Tr =18 horas



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB, ECOPETROL.

Figura 5. Corrida en continuo Tr =18 h (con limitación de O₂)



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB, ECOPETROL.

Del anterior estudio se puede concluir:

- A un mayor tiempo de residencia los porcentajes promedio de remoción de fenol son más altos.
- Las fluctuaciones de fenol y pH que se presentan a la entrada del bio-reactor afectan notablemente el proceso, a pesar de que éste tiende a disiparlos. Estos cambios bruscos alejan al sistema de mantener un porcentaje de remoción estable.
- A pesar de las fluctuaciones de pH en el afluente, el pH dentro del reactor se mantiene entre 5.5-7.5. Al aumentar por encima de 7.5, tiende a presentarse un porcentaje de remoción inferior (inhibición de microorganismos).
- Se confirma con la última etapa de las corridas en continuo (limitación O₂), que este juega un papel primordial en el proceso de biodegradación de fenol para este pool de microorganismos. Lo cual se confirma, al comparar con la anterior condición de operación donde se mantuvo un flujo constante de oxígeno y un mismo tiempo de residencia (18 horas), y se alcanzó un porcentaje promedio de remoción de 77%, mientras que para las condiciones con limitación de oxígeno, el porcentaje promedio de remoción fue solamente del 20%.

Las curvas, en general, muestran la tendencia a mantener una concentración de fenol entre un rango pequeño y bajo a la salida del bio-reactor; sin embargo, las fluctuaciones a la entrada no permiten una estabilidad general del sistema.

Para un tiempo de residencia de 30 horas se alcanzó un porcentaje de remoción promedio de 96.8%, mientras que para 24 horas de 83.86% y, para 18 horas de 77%. Estos dos últimos porcentajes pudieron ser un poco más altos si las condiciones a la entrada del bio-reactor hubiesen sido más estables; aun así, muestran la influencia del tiempo de contacto de los microorganismos con el sustrato con el fin de alcanzar porcentajes de biodegradación adecuados.

1.3. SOLUCIÓN PROPUESTA: SIMULACIÓN MEDIANTE MODELOS MATEMÁTICOS

Debido a la complejidad del fenómeno de la biodegradación de fenol, se propone plantear y desarrollar un modelo matemático que describa el proceso de tratamiento de estas aguas residuales a partir de las principales variables de operación. El modelo debe contener una ecuación cinética que se ajuste al proceso para cual se deben determinar los parámetros cinéticos propios del sistema de tratamiento biológico.

El desarrollo del modelo matemático pretende en primera medida lograr una mayor comprensión del proceso de biodegradación de fenol a partir de la simulación para posteriormente, obtener un modelo descriptivo/predictivo del sistema a partir de sus variables más relevantes. De esta manera, se busca evaluar la influencia de las diferentes variables e identificar aquellas que intervienen en gran medida en la eficiencia del proceso. Para esto se propone desarrollar una solución software como herramienta metodológica que permita evaluar el sistema en diferentes escenarios de operación.

Posteriormente, se pretende desarrollar estrategias que permitan diseñar programas de control y optimización del proceso de biodegradación, los cuales permitan un mejoramiento del proceso de remoción de compuestos fenólicos actual. El objetivo en paralelo con el desarrollo de innovación tecnológica busca garantizar el cumplimiento de exigencias internas y principalmente la búsqueda de soluciones que permitan el cumplimiento de la legislación ambiental vigente en cuanto a concentración de fenol en los efluentes que desembocan en cuerpos de agua receptores.

Es de recalcar además que este trabajo de grado es el primero en la región en simular el proceso de biodegradación a escala industrial (real), incluyendo inhibiciones cinéticas de distinta naturaleza y limitaciones por variables de diseño y de funcionamiento del proceso.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. TRATAMIENTOS BIOLÓGICOS

Los procesos biológicos se utilizan para convertir la materia orgánica, que se encuentra finamente dividida y disuelta en el agua residual, en sólidos sedimentables floculentos que puedan separarse en tanques de sedimentación; aunque estos procesos se usen junto con los físicos y químicos, empleados en el tratamiento preliminar del agua residual, no deben considerarse como sustitutivos de aquellos. La sedimentación primaria es muy eficaz para separar los sólidos suspendidos hasta de cierto tamaño, en tanto que, los procesos biológicos lo son en la separación de sustancias orgánicas que sean solubles o estén dentro del tamaño coloidal.

Las características de los microorganismos que intervienen en las reacciones biológicas para la degradación de la materia orgánica son, las que permiten establecer una clasificación de los procesos biológicos de las aguas residuales. En función de la dependencia del oxígeno por parte de los microorganismos fundamentalmente responsables de las reacciones biológicas, los tratamientos biológicos pueden clasificarse en: procesos aerobios, procesos anaerobios y procesos facultativos.

En estas circunstancias, mientras los procesos aerobios son los procesos de tratamiento biológico que se dan en presencia de oxígeno, los anaerobios, por otra parte, son aquellos que se dan en ausencia de oxígeno, mientras que los procesos facultativos son aquellos en los que los organismos responsables pueden funcionar en presencia o ausencia de oxígeno molecular. [1]

La mayoría de los procesos biológicos son procesos aerobios, principalmente debido a las ventajas que estos procesos presentan frente a los anaerobios. Sin embargo, los tratamientos anaerobios son también utilizados y juegan un papel importante en la degradación de los lodos generados. De esta manera, en la Tabla 1, podemos identificar las ventajas y desventajas de estos procesos.

Tabla 1. Ventajas y desventajas de los procesos aerobios y anaerobios

PARÁMETROS	AEROBIOS	ANAEROBIOS
Energía	Alto	Bajo
% Eliminación	> 95%	60 – 90%
Producción de fangos	Alta	Baja
Estabilidad	Moderada – Alta	Baja – Moderada
Puesta en marcha	2 – 4 semanas	2 – 4 meses
Generación de olores	Menor	Mayor
Alcalinidad	Baja	Alta
Generación de biogás	No	Sí
Presencia de nutrientes	Puede ser alta	Baja

Fuente: Stephenson, et al, 2000, p. 43

Los procesos biológicos se pueden dividir, a su vez, dependiendo de si el tratamiento se lleva a cabo en sistemas de cultivo en suspensión, en sistemas de cultivo fijo o en sistemas resultantes de la combinación de ambos.

Los procesos de cultivo en suspensión pueden definirse como los procesos de tratamiento biológico en los que los microorganismos responsables de la conversión de materia orgánica (u otros constituyentes del agua residual en gases y tejido celular), se mantienen en suspensión dentro del líquido [Metcalf and Eddy, 1995, p.431], a diferencia de los procesos de cultivo o película fija, en los que los microorganismos responsables de dicha conversión están fijados a un medio inerte, especialmente diseñado para cumplir con esta función. Se debe hacer constar que, todos los procesos biológicos que se emplean en el tratamiento de agua residual tienen su origen en fenómenos y procesos que se producen en la naturaleza, adaptando las condiciones para obtener rendimientos óptimos en el proceso para el cual han sido diseñados.

2.2. CRECIMIENTO BACTERIANO

Cuando se siembran microorganismos en un medio de cultivo apropiado, los mismos comienzan a dividirse activamente empleando los nutrientes que le aporta el medio de cultivo para "fabricar" nuevos microorganismos. Este proceso continúa hasta que algún nutriente del medio de cultivo se agota (sustrato limitante) y el crecimiento se detiene. Aunque también, puede detenerse el crecimiento por acumulación de alguna sustancia inhibidora formada por los mismos microorganismos; pero supóngase por ahora que éste no es el caso y que la primera alternativa es la válida. Entonces, hay dos aspectos claramente diferenciables que definen el crecimiento microbiano: uno estequiométrico, por el cual la concentración final de microorganismos obtenidos dependerá de la concentración y composición del medio de cultivo; y el otro cinético, el cual dirá con qué velocidad se lleva a cabo el proceso.

2.2.1. Estequiometría del crecimiento microbiano

La aplicación de la estequiometría requiere conocer los rendimientos. Éstos se definen como la relación entre el producto obtenido y el sustrato consumido (usualmente la fuente de carbono y energía). Por ejemplo, el rendimiento celular se define como:

$$Y_{x/S} = -\frac{dx}{dS} \quad (1)$$

X y **S** representan la concentración de biomasa y sustrato respectivamente. En la práctica, para el cálculo del $Y_{x/S}$ se emplea la expresión:

$$Y_{x/S} = -\frac{\Delta x}{\Delta S} \quad (2)$$

2.2.2. Cinética de crecimiento

Debido a la naturaleza auto catalítica del crecimiento microbiano, es lógico suponer que la concentración de microorganismos, X , influye en la velocidad con que aumenta la población, r_x , así:

$$r_x = \mu * X \quad (3)$$

En esta ecuación, μ es la velocidad específica de crecimiento, la cual para un tipo de microorganismo dado depende principalmente de la composición y concentración del medio de cultivo, presencia de inhibidores, temperatura y pH.

Existen diversas expresiones para μ ; la más difundida es la ecuación de Monod, la cual relaciona el valor de μ con la concentración de un componente del medio de cultivo que está en defecto con respecto de los requerimientos del microorganismo: el sustrato limitante.

$$\mu = \mu_M \frac{S}{K_S + S} \quad (4)$$

Donde S es la concentración de sustrato limitante, μ_M es la velocidad de crecimiento específica máxima, y K_S se conoce como constante de saturación. El valor de K_S está inversamente relacionado con la afinidad del microorganismo por el sustrato.

Cuando S es mayor que K_S , μ toma el valor de μ_M y r_x sólo depende de X .

En general, K_S tiene valores muy bajos, del orden de los mg l⁻¹, por tanto concentraciones relativamente bajas de S son suficientes para hacer que μ sea igual a μ_M . En promedio las bacterias poseen valores de μ_M cercanos a 0.9 h⁻¹, las levaduras 0.45 h⁻¹ y los hongos filamentosos 0.25 h⁻¹; de todos modos, μ_M debe ser determinado experimentalmente para cada caso en particular.

La presencia de inhibidores del crecimiento en el medio de cultivo causa disminución en el valor de μ . La sustancia inhibidora puede ser algún componente del medio de cultivo o algún producto formado por los microorganismos. El tipo de inhibición, al igual que en cinética enzimática, puede ser competitiva o no competitiva.

Para el primer caso:

$$\mu = \mu_M \frac{S}{K_S a + S} \quad (5)$$

mientras que para el segundo

$$\mu = \frac{\mu_M}{a} \frac{S}{K_s + S} \quad (6)$$

donde

$$a = 1 + \frac{I}{K_I} \quad (7)$$

Siendo I la concentración de inhibidor. El valor de K está inversamente relacionado con la afinidad del microorganismo por el inhibidor. En la inhibición competitiva, se modifica en valor de K_s . Puesto que $a > 1$ si existe inhibidor (ecuación), resulta que la afinidad del microorganismo por el sustrato se ve disminuida. En la inhibición no competitiva es el valor de μ_M el que resulta afectado.

En ocasiones algún componente del medio de cultivo puede ser inhibidor del crecimiento sobre todo, cuando se encuentra en concentraciones relativamente elevadas. Esto es factible que ocurra con la fuente de carbono y energía por ser el componente que se encuentra en mayor proporción en los medios. Suele emplearse la siguiente expresión propuesta por Haldane para considerar este efecto:

$$\mu = \frac{\mu_M}{a} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_I}} \quad (8)$$

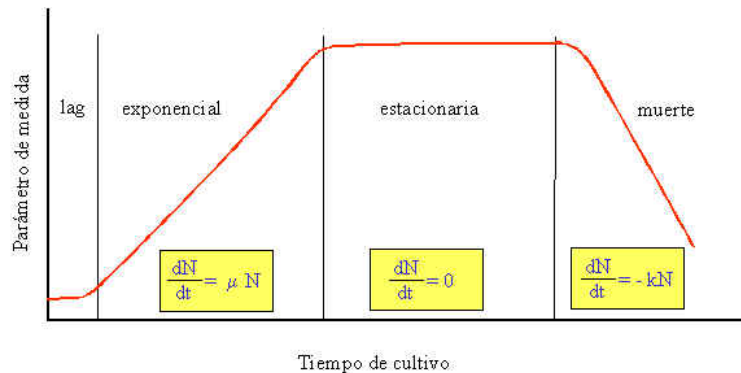
El hecho de que una concentración de sustrato elevada pueda inhibir el crecimiento, impone una restricción a la concentración de los medios de cultivo que se pueden emplear en la práctica, y con esto a la concentración final de biomasa que se puede obtener.

2.2.3. Curva de crecimiento

La curva del crecimiento bacteriano resulta de la representación gráfica de la determinación periódica del número de células viables por mililitro que existen en un líquido inoculado con células microbianas provenientes de un cultivo que ha crecido previamente hasta la saturación.

Dicha curva se divide en cuatro (4) fases, como se representa en la figura 5.

Figura 5. Curva típica del crecimiento bacteriano.



Fuente: <http://www.monografias.com/trabajos10/cinrec/cinrec.shtml>

Fase Lag o de Rezago

Este periodo consiste en la adaptación de las células microbianas a su nuevo ambiente. En esta fase, las células microbianas se encuentran empobrecidas en cuanto a metabolitos y enzimas, esto debido a las condiciones desfavorables que representaba el cultivo previo.

Por lo anterior, en este lapso de tiempo se forman las enzimas y los metabolitos intermedios hasta alcanzar las concentraciones necesarias para reiniciar el crecimiento. Este periodo se puede prolongar en el caso de que el medio de cultivo previo y las condiciones actuales resulten tan diferentes que las células sean genéticamente incapaces de sobrevivir, por lo que sólo unas cuantas mutantes podrán subsistir y, obviamente se requerirá más tiempo para que éstas se multipliquen lo suficiente y sea notorio el aumento de células.

Fase Exponencial

Como su nombre lo indica, en esta fase las células se encuentran en un estado de crecimiento sostenido. Se sintetiza nuevo material celular a una tasa constante, pero este material es en sí catalítico y la masa aumenta de manera exponencial. Lo anterior continúa hasta que uno o más nutrientes se agoten o, hasta que se acumule tal cantidad de metabolitos tóxicos que se inhiba el crecimiento. El nutrimento limitante para los organismos aerobios suele ser el oxígeno: cuando la concentración bacteriana es de aproximadamente 1×10^7 / ml es necesario incrementar el ingreso de oxígeno mediante agitación o burbujeo; pero cuando la concentración alcanza 4 o 5×10^9 bacterias por ml, la tasa de difusión de oxígeno no puede satisfacer las demandas aún en un medio aireado, por lo que el crecimiento disminuye progresivamente.

Durante el crecimiento exponencial, la tasa de crecimiento de las células (medida en gramos de biomasa producida por hora), cuando el crecimiento no es limitado por los nutrientes, se puede obtener multiplicando la constante de la tasa de crecimiento (k) por la concentración de biomasa. La constante de la tasa de crecimiento es la tasa a la cual las

células producen más células, y el valor que ésta toma se interpreta como los gramos de biomasa producidos por cada gramo de biomasa preexistente, creados en una hora.

El crecimiento se denomina exponencial porque la biomasa se incrementa exponencialmente con respecto al tiempo. De lo anterior se deriva que, si graficamos el logaritmo de la concentración de la biomasa (o celular) en función del tiempo como ocurre en la curva del crecimiento obtendremos una línea recta como representación de esta fase.

Fase Estacionaria

Ante el agotamiento de nutrientes en el medio o la acumulación de metabolitos tóxicos, el crecimiento cesa por completo. No obstante, por lo general en esta fase se puede observar recambio celular, lo cual se debe a que, aunque existe una pérdida lenta de células por muerte, dicha pérdida se compensa exactamente por la formación de nuevas células a través de crecimiento y división. Así, la cifra de células viables se mantiene constante, aunque en realidad en el conteo aumente poco a poco el número de células, si se cuentan también las muertas.

Para comprender lo anterior, debemos considerar que para una célula microbiana, muerte significa la pérdida irreversible de la capacidad para reproducirse (crecer y dividirse) lo cual se comprueba cuando una célula es incapaz de producir una colonia en cualquier medio. De lo anterior, se deriva que designar a una célula microbiana como muerta, no implica su destrucción física.

La duración de esta fase depende de la naturaleza del microorganismo y de las condiciones del medio.

Fase de Declinación o Muerte Celular

Esta fase también conocida como fase de muerte, representa el decremento de células debido al aumento progresivo de la tasa de mortalidad, la misma que tarde o temprano alcanza un valor sostenido.

Por lo general, una vez que la mayoría de las células han muerto, la tasa de mortalidad disminuye bruscamente, por lo que un número pequeño de sobrevivientes pueden persistir en cultivo por meses o años. Dicha persistencia puede deberse a que las células consiguen crecer gracias a los nutrientes liberados por las células que mueren.

2.3. FACTORES FÍSICOS Y QUÍMICOS QUE INFLUYEN EN EL CRECIMIENTO BACTERIANO [1]

2.3.1. Temperatura

Cada microorganismo tiene una temperatura de crecimiento óptima. Si se considera la variación de la velocidad de crecimiento en función de la temperatura de cultivo, se puede observar una temperatura mínima por debajo de la cual no hay crecimiento; a temperaturas mayores se produce un incremento lineal de la velocidad de crecimiento con la temperatura de cultivo hasta que se alcanza la temperatura óptima en la que la velocidad es máxima. Por encima de esta temperatura óptima, la velocidad de crecimiento decae bruscamente y se produce la muerte celular.

El aumento de la velocidad de crecimiento con la temperatura, se debe al incremento generalizado de la velocidad de las reacciones enzimáticas con la temperatura. En términos generales, la velocidad de las reacciones bioquímicas suele aumentar entre 1.5 y 2.5 veces al aumentar 10 °C la temperatura a la que tienen lugar.

La falta de crecimiento a temperaturas bajas se debe a la reducción de la velocidad de las reacciones bioquímicas y al cambio de estado de los lípidos de la membrana celular que pasan de ser fluidos a cristalinos impidiendo el funcionamiento de la membrana celular.

La muerte celular a altas temperaturas se debe a la desnaturalización de proteínas y a las alteraciones producidas en las membranas lipídicas en dichas temperaturas.

2.3.2. pH

Cada tipo de microorganismo tiene un rango de pH en el que puede vivir adecuadamente, de lo contrario, muere fuera de este rango.

El pH intracelular es ligeramente superior al del medio que rodea las células ya que, en muchos casos, la obtención de energía metabólica depende de la existencia de una diferencia en la concentración de protones a ambos lados de la membrana citoplásmica.

El pH interno en la mayoría de los microorganismos está en el rango de 6,0 a 8,0. Los rangos de pH tolerables por diferentes tipos de microorganismos son también, distintos. Hay microorganismos acidófilos que pueden vivir a pH=1.0 y otros alcalófilos que toleran pH=10.0.

Como consecuencia del metabolismo, el pH del medio de crecimiento suele tender a bajar durante el cultivo. Por otra parte, el descenso del pH del medio que producen ciertos microorganismos les confiere una ventaja selectiva frente a otros competidores.

El descenso del pH se puede deber a varios factores; uno de ellos es la liberación de ácidos orgánicos de cadena corta (fórmico, acético, láctico) por ciertas bacterias.

Figura 6. Efecto del pH sobre μ_M . Curva a) Hongos b) Bacterias.

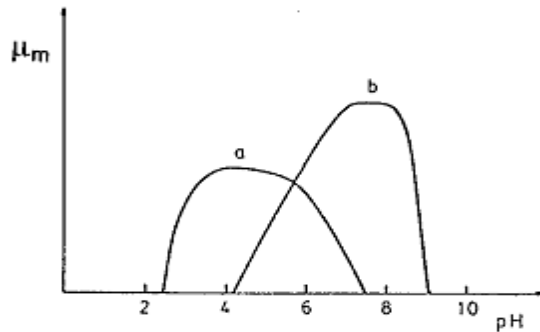
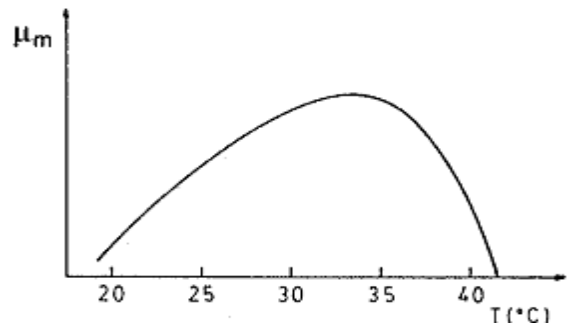


Figura 7. Efecto de la temperatura sobre μ_M para un microorganismo mesófilo



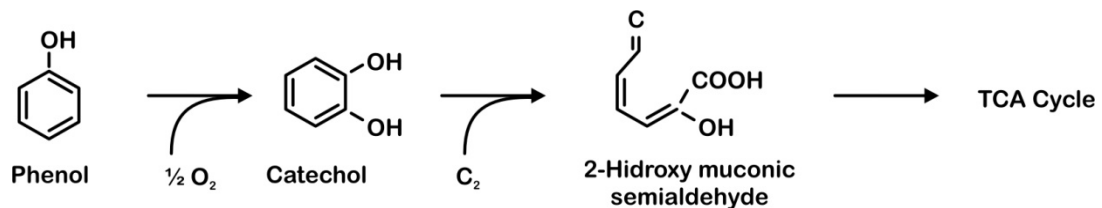
Fuente: <http://www.monografias.com/trabajos10/cinrec/cinrec.shtml>

2.4. BIOTRANSFORMACIÓN DE FENOL

Los fenoles llegan a los cursos de agua como efluentes de algunas industrias, tales como: las de plásticos, fibras sintéticas, refinerías de petróleo, detergentes, pesticidas, pinturas, farmacéuticas, etc.

El fenol es un compuesto tóxico para los microorganismos, pero también es una fuente de carbono y energía para la biomasa adaptada a su entorno. Una típica ruta para metabolizar un compuesto aromático es dihidroxilar el anillo de benceno para formar un derivado de catecol y luego abrir el anillo por oxidación.

Figura 8. Ruta típica de metabolización de Fenol



Fuente: Karegoudar y Kim, 2000

El tratamiento biológico de aguas residuales con contenidos fenólicos es especialmente recomendable ya que permite degradar dichas sustancias generando productos finales inocuos. La mayoría de los estudios realizados sobre la biodegradación de fenol se llevaron a cabo en cultivos puros de microorganismos, bajo condiciones de esterilidad (Kumaran y Paruchuri, 1997, Yan y col., 2005). Goudar y col. (2000) estudiaron la degradación de fenol en reactores *batch* usando un cultivo mixto adaptado a este compuesto. [Melo y col].

La obtención de parámetros cinéticos y estequiométricos correspondientes a la degradación biológica de los compuestos presentes en las aguas residuales industriales,

resulta necesaria para el adecuado diseño y operación de los sistemas de biotratamientos.

2.5. TRANSFERENCIA DE O₂

La velocidad de transferencia de O₂, RO_2 , desde el seno de la fase gaseosa (burbujas) hasta la fase líquida está dada por la siguiente ecuación:

$$RO_2 = K_L a (C^* - C) \quad (9)$$

donde $K_L a$ es el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno, C la concentración de O₂ disuelto en el seno del líquido y C^* la concentración de O₂ disuelto, que estaría en equilibrio con la presión parcial de oxígeno de la fase gaseosa. El $K_L a$ depende del diseño del bio-reactor, de las condiciones de operación (caudal de aire, agitación) y de la viscosidad del cultivo. A mayor viscosidad menor $K_L a$.

El $K_L a$ es una medida de la capacidad que posee un bio-reactor para suministrar O₂ y el rango de valores usuales está comprendido entre 50 h y 1000 h⁻¹.

2.5.1. Proceso de Reaireación [2]

Se conoce como reaireación el proceso por el cual el oxígeno y demás componentes gaseosos del aire son renovados en las aguas en movimiento. La solubilidad del oxígeno puede ocurrir solo en la interfaz aire-agua, donde una película delgada de agua es rápidamente saturada. La tasa de reaireación posterior depende de la difusión del oxígeno a través del cuerpo de agua, la cual es muy lenta. En aguas con turbulencia, la capa superficial saturada se rompe continuamente y el proceso de reaireación se efectúa más rápido. [60]

Algunos autores, con tal de cuantificar la reaireación, utilizan el coeficiente de intercambio F , el cual mide la tasa de reaireación por unidad de área expuesta, por unidad de déficit de OD.

$$F = K_2 * V / A \quad (10)$$

Donde: V = volumen de agua por debajo de la interfaz

A = área de la interfaz aire-agua.

K_2 = constante de reaireación.

Tabla 2. Valores típicos de F

CONDICIÓN	F, MM/H
Agua estancada	4-6
Agua en canal a 0.01m/s	10
Agua en canal a 0.17	75
Agua en canal a 0.25m/s	300
Mar abierto	130
Lecho turbulento	300-2000
Agua fluyendo con pendiente 30°	700-3000

Fuente: Peavy Howard S.; Rowe Donald R. y Tchobanoglous George

Según Owens, Edwards y Gibas, el valor de F a 20°C puede calcularse, de acuerdo con estudios, por la siguiente ecuación:

$$F = 78200V^{0.67} H^{-0.85} \quad (11)$$

Donde: **F**= coeficiente de intercambio, mm/h.
V= velocidad del agua, m/s
H= profundidad promedio, mm.

Para una temperatura mayor, el incremento de **F**, es de un 2% de su valor por cada grado centígrado.

Para valorar la constante de reaeración (**K₂**) se han desarrollado muchas ecuaciones en estudios de ríos y cuerpos de agua con muy diferentes características hidráulicas. Entre las más comunes:

A) Ecuación de O' Connor-Dobbins

$$K_2 = \frac{D_L^{0.5} v^{0.5}}{H^{1.5}} \quad (12)$$

K₂= constante de reaeración, d⁻¹
v = velocidad promedio de la corriente longitudinal, m/d
H = profundidad media, m.
D_L= coeficiente de difusión molecular del oxígeno en agua
D_{L,20} = 1.76*10⁻⁴ m²/d a 20°C

La variación con la temperatura se calcula por la ecuación de Arrhenius:

$$D_{L,T} = 1.76 * 10^{-4} (1.037)^{T-20} \quad (13)$$

Tabla 3. Otras ecuaciones comunes para determinar K_2

MODELO	ECUACIÓN	UNIDADES
Ecuación de Churchill	$K_2 = (5.03v^{0.969} / H^{1.673})$ (4)	v (m/s), H (m) K_2 (d^{-1})
Ecuación de Owens	$K_2 = (5.34v^{0.67} / H^{1.85})$ (5)	v (m/s), H (m) K_2 (d^{-1})
Ecuación de reaireación de Texas	$K_2 = (1.923 v^{0.273} / H^{0.894})$ (6)	v (m/s), H (m) K_2 (d^{-1})
Ecuación de Langbein y Durum	$K_2 = (2.2v / H^{1.33})$ (7)	v (m/s), H (m) K_2 (d^{-1})

Fuente: Ojumu, T.V, Bello, O.O, Sonibare, J.A. y Solomon, B.O

2.6. NOMENCLATURA

		Unidades
Fi	Flujo corrientes entrada y salida	$(m^3 h^{-1})$
F'	Flujo de recirculación	$(m^3 h^{-1})$
X	Concentración de biomasa	$(mg l^{-1})$
Xo	Concentración inicial de biomasa	$(mg l^{-1})$
S	Concentración de fenol	$(mg l^{-1})$
So	Concentración inicial de fenol	$(mg l^{-1})$
[H₂S]	Concentración de sulfuro	$(mg l^{-1})$
[NH₃]	Concentración de amonio	$(mg l^{-1})$
[HC]	Concentración de hidrocarburo	$(mg l^{-1})$
T	Temperatura	$(^{\circ}C)$
Cp	Capacidad calorífica	$(Kcal ^{\circ}C^{-1})$
pm	Densidad fase líquida	$(kg (m^3)^{-1})$
U	Coeficiente global transferencia calor	$(Kcal m^2 h^{-1}^{\circ}C^{-1})$
YΔ	Coeficiente de generación de calor	$(g células Kcal^{-1})$
KIa	Coeficiente transferencia de oxígeno	(h^{-1})
Y_{x/i}	Coeficientes de rendimiento para cada i- componente.	$(mg mg^{-1})$
C*	Concentración de saturación de O ₂	$(mg l^{-1})$

Parámetros cinéticos:

μ_M	Velocidad específica máxima de crecimiento	(h^{-1})
Ks	Constante de saturación media	$(mg l^{-1})$
K_{is}	Constantes de inhibición para el fenol.	$(mg l^{-1})$
K_{iH}	Constantes de inhibición para el sulfuro.	$(mg l^{-1})$
K_{iN}	Constantes de inhibición para el amonio.	$(mg l^{-1})$
K_{iHC}	Constantes de inhibición para el hidrocarburo.	$(mg l^{-1})$
K_{O2}	Constante saturación media de O ₂	$(mg l^{-1})$

3. MODELO CINÉTICO

El proceso de biodegradación es un fenómeno netamente bio-químico, cuya velocidad de reacción varía en el tiempo. Es por esta razón que es necesario definir un *Modelo Cinético* que describa la variación de la velocidad del proceso de biodegradación a través del tiempo, [7, 12, 15-16, 19-20, 25-28, 33, 36, 61-66], en función de las variables y efectos condicionantes ya identificados.

El modelo utilizado para describir el comportamiento cinético fue el modelo de Haldane [1]. El modelo contiene un factor “a” que corresponde a la presencia en el sistema de inhibición competitiva por parte del sulfuro, amonio e hidrocarburo.

Con el fin de tener en cuenta como variable “relevante” el oxígeno en la cinética, se adiciona como factor multiplicativo siguiendo el modelo cinético de Monod simple.

El modelo cinético es:

$$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{(Ks * a) + S + \left(\frac{S^2}{Ki_s}\right)}, \text{ donde } a = 1 + \frac{[I]}{Ki_i}. \text{ [Haldane, 1930]} \quad (14)$$

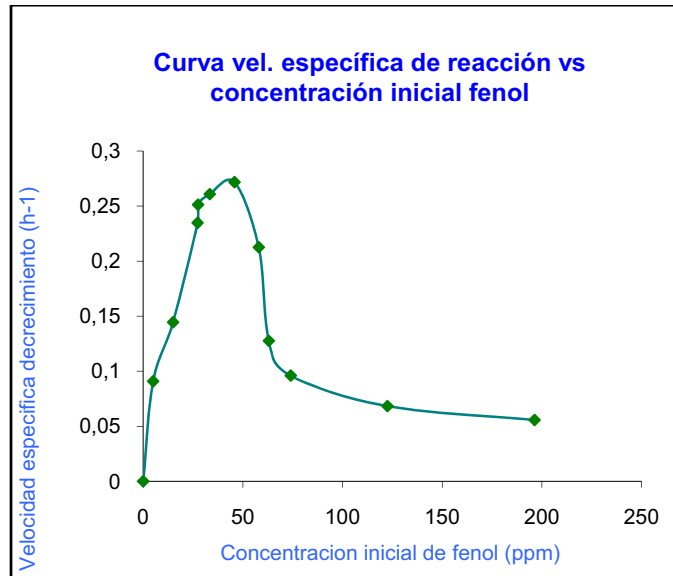
Entonces:

$$\mu_i = \frac{\mu_{\max} * S_i}{Ks \left[\left(1 + \frac{[H_2S]_i}{Ki_{H_2S}}\right) \left(1 + \frac{[NH_3]_i}{Ki_{NH_3}}\right) \left(1 + \frac{[HC]_i}{Ki_{HC}}\right) \right] + S + \left(\frac{S^2}{Ki_S}\right)} * \left(\frac{[O_2]_i}{KO_2 + [O_2]_i}\right) \quad (15)$$

Donde *i* corresponde a cada reactor.

Las corridas experimentales realizadas en el desarrollo del proyecto global identificaron el efecto de la concentración inicial de fenol en la velocidad de reacción.

Figura 9. Efecto inhibitorio del fenol sobre la biomasa



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

Los parámetros cinéticos para el modelo son:

Tabla 4: Relación de los parámetros cinéticos

μ_{max}	K_i	K_s
0,2853	51,165	10,2 mg/L

Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

3.1. MODIFICADORES DEL MODELO CINÉTICO

Del estudio previo al desarrollo al modelo matemático, y en apoyo en la documentación encontrada sobre la biodegradación del fenol usando un pool de bacterias *Pseudomona putida*, se tiene conocimiento de la existencia de un efecto inhibitorio producido por la presencia de ciertos compuestos, entre ellos amonio y sulfuro, así como de ralentizaciones en el proceso de biodegradación debido a los niveles de Oxígeno disponible y pH del agua

3.1.1. Inhibición por Amonio

- No se presenta un efecto inhibitorio en la biodegradación de Fenol por amonio en el rango de concentraciones de amonio utilizadas (entre 1-1500ppm).

- El amonio presenta fluctuaciones dentro del proceso de biodegradación, aunque la tendencia global del comportamiento del ión amonio es su disminución con el tiempo.
- Del tratamiento de los datos experimentales, se obtiene una constante de inhibición para el amonio de $K_{i_{NH_3}} = 18863 \text{ ppm}$, la cual es una inhibición despreciable para el proceso de degradación del fenol, debido a que, en promedio, el ión amonio que entra al sistema es de 45ppm.

3.1.2. Inhibición por Sulfuro

- El H_2S causa un efecto inhibitorio en el proceso de biodegradación de fenol, viéndose reflejado en el aumento de la *fase de retardo* o *lag* a medida que la concentración de H_2S se incrementa. Sin embargo, a pesar de aumentar el tiempo de la *fase lag*, se determina que hasta concentraciones iniciales de 100 ppm de H_2S y concentraciones iniciales de fenol hasta de 60ppm, se logra luego de 16 horas de reacción, concentraciones de fenol por debajo de 1 ppm.
- A partir de los datos experimentales se calculó una constante de inhibición para el sulfuro $K_{i_{H_2S}} = 1.6 \text{ ppm}$

3.1.3. Efecto del Hidrocarburo

Los resultados de las pruebas de biodegradación de fenol con diferentes concentraciones de hidrocarburo iniciales, muestran porcentajes de biodegradación del 100% al cabo de cinco horas de reacción para cada una de las corridas. La presencia de concentraciones de hidrocarburo hasta de 4600 ppm, no muestran un efecto en el proceso de biotransformación de fenol ni en el crecimiento del consorcio bacteriano.

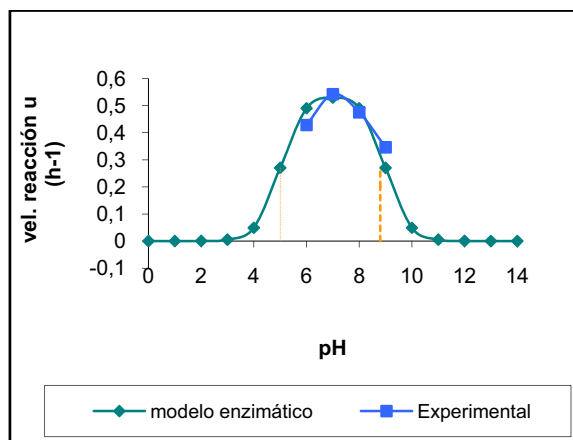
3.1.4. Efecto del pH

Se realizaron varias corridas de degradación de fenol con diferentes pH iniciales entre 5 y 10. Para cada corrida se tomaron medidas de pH, fenol, y microorganismos durante las 14 horas de la prueba.

Se determinó una correlación entre la velocidad máxima de reacción y la concentración de hidrogeniones en solución a partir de un modelo enzimático que representa la relación entre la velocidad de crecimiento celular y el pH externo. (Ecuación 16); En la figura 10 se observa la curva típica de velocidad específica de reacción en función del pH (curva verde).

$$p(pH) = \frac{10^{-pH}}{k_1} + 1 + \frac{k_2}{10^{-pH}} \quad (16)$$

Figura 10. Velocidad específica de crecimiento en función del pH



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

La ecuación cinética que describe el sistema de estudio es:

$$\mu_i = \left(\frac{0.2853}{p(pH)} \right) * \frac{S_i}{10.21 \left[\left(1 + \frac{[H_2S]_i}{1.6} \right) \left(1 + \frac{[NH_3]_i}{18863} \right) \left(1 + \frac{[HC]_i}{K_{iHC}} \right) \right] + S + \frac{S^2}{51,165}} * \left(\frac{[O_2]_i}{K_{O_2} + [O_2]_i} \right) \quad (17)$$

3.2. INCLUSIÓN DE LA VARIACIÓN DEL pH EN EL FLUJO DE ENTRADA

Existen algunos constituyentes que aportan en gran medida a las variaciones o cambios en el pH del efluente a las plantas de tratamiento de aguas residuales contaminadas con fenol. Entre los componentes activos y que permiten generar cambios de pH se encuentran los sulfuros, el amoníaco, los carbonatos y en menor medida el fenol. Los demás constituyentes son bases extremadamente débiles o hidrocarburos que no aportan hidrogeniones a la solución.

Tabla 5. Caracterización iónica aguas

CARACTERIZACIÓN IÓNICA AGUAS A TRATAR		
Análisis	Componente	Unidad
Carbonatos y Bicarbonatos	Carbonatos	mg CO ₃ /L
Carbonatos y Bicarbonatos	Bicarbonatos	mg HCO ₃ /L
Cloruros en aguas por potenciometría	Cloruros	mg Cl/L
Nitratos en aguas (fotométrico)	Nitratos NO ₃ Método fotométrico	mg NO ₃ /L
Nitritos en aguas (fotométrico)	Nitritos (NO ₂) Método fotométrico	mg NO ₂ /L
Nitrógeno amoniacal en aguas por potenciometría.	Nitrógeno amoniacal Método potenciométrico.	mg NH ₃ /L
pH / T (°C) en aguas	pH / T (°C) en aguas	Unidades pH

Sulfato en agua por turbidimetría	Sulfatos	mg SO ₄ /L
Sulfuro en aguas agrias	Sulfuro	mg/L

Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

En consecuencia tenemos 4 componentes principales que determinan el pH, los cuales poseen las siguientes reacciones de disociación en solución:

Sulfuro de Hidrógeno



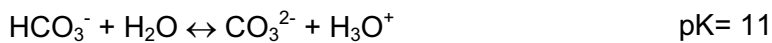
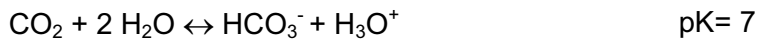
Amoniaco



Fenol



Dióxido de carbono (Bicarbonato-Carbonato)



El balance de cargas resultante es:

$$[\text{H}^+] + [\text{NH}_4^+] = [\text{OH}^-] + 2[\text{S}^{2-}] + [\text{HS}^-] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{fenol}^-] \quad (18)$$

La transformación de esta ecuación da como resultado una ecuación que representa [H⁺]

$$[\text{H}^+] = f([\text{S}^{2-}], [\text{CO}_3^{2-}], [\text{fenol}]) \quad (19)$$

$$[\text{OH}^-] = f([\text{NH}_3]) \quad (20)$$

$$[H^+] = \sqrt{[S^{-2}] * K_3} + \sqrt{[CO_3^{-2}] * K_6} + \sqrt{[fenol^-] * K_4} \quad (21)$$

$$[OH^-] = \sqrt{[NH_3] * K_1} \quad (22)$$

$$[H^+] - [OH^-] = b \quad b > 0, pH = -\log[H^+] \quad (23)$$

$$b = 0, pH = 7 \quad (24)$$

$$b < 0, pOH = -\log[OH^-], pH = 14 - pOH \quad (25)$$

El modelo a partir del balance de cargas brinda un valor aproximado del valor de pH de la corriente, a partir de las concentraciones de las especies tenidas en cuenta.

3.3. RENDIMIENTOS

El rendimiento es definido como la diferencia de biomasa producida sobre la diferencia de sustrato consumido en un tiempo t.

$Y_{x/i}$: Δ gramos biomasa en el tiempo " t" / Δ gramos de sustrato i en el tiempo " t"

Las unidades de $Y_{x/i}$ son entonces: [g biomasa/ g sustrato i]

En el proceso de biodegradación de fenol se definen los siguientes rendimientos: $Y_{x/HC}$. Y_{x/NH_3} , $Y_{x/s}$, respecto al hidrocarburo, amonio y fenol respectivamente.

Tabla 6. Relación de los rendimientos utilizados experimentales

$Y_{x/s}$	Y_{x/NH_3}	Y_{x/O_2}
0,8 g biomasa / g fenol	5,8 biomasa / g fenol	1 biomasa / g fenol

Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

Estos rendimientos calculados a partir de datos reales, se mantendrán constantes para el objeto de estudio.

3.4. MUERTE CELULAR

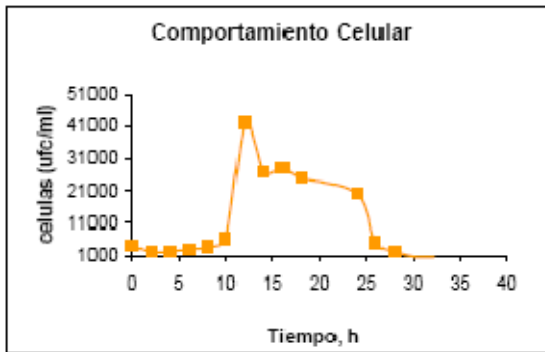
En el balance de masa correspondiente a la biomasa, es incluida la tasa de muerte, la cual es función de la población viable y de las características ambientales.

El modelo para la fase de declinación o muerte se muestra en la ecuación 26. K_d corresponde al coeficiente de desaparición de los microorganismos (tiempo -1) y x corresponde a la concentración de microorganismos.

$$\frac{dx}{dt} = -K_d x \quad (26)$$

En una de las corridas experimentales realizadas durante 32 horas en *batch* se observó las fases típicas de crecimiento microbiano, la última fase, luego de la hora 25 en la figura 11 corresponde a la fase de muerte celular.

Figura 11. Comportamiento celular durante la corrida



Fuente: Gerencia Complejo Barrancabermeja, GCB

El coeficiente de muerte de microorganismos, K_d , se calculó por medio de la pendiente de la curva correspondiente a esta última fase. $K_d = 0.0032 \text{ h}^{-1}$.

4. METODOLOGÍA

4.1. DESARROLLO DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS PROTOTIPO

Para el desarrollo del modelo matemático se utilizó una metodología de prototipos consecutivos. Así, cada nuevo prototipo es por tanto más exacto en la definición de los variables del prototipo anterior, además de incluir nuevas variables al modelo. Con esto se logra un desarrollo modular, progresivo y constante, lo que da una solidez y veracidad intrínseca al último modelo desarrollado, y una mejor optimización de los resultados simulados frente a los resultados experimentales.

En otras palabras, se partió de un sistema de ecuaciones sencillo, que conlleva un modelo cinético que no contempla inhibiciones ni modificaciones de ninguna clase, al cuál, durante el desarrollo del proyecto, se modificó agregando nuevas variables que describen fenómenos paralelos a la biodegradación, lo que permite además eliminar simplificaciones y reducciones típicas de los modelos matemáticos iniciales.

Durante la ejecución del proyecto se desarrollaron un total de siete (7) prototipos en el desarrollo de la línea principal, así como un sin número de *pequeños modelos* que aportaron más veracidad al modelo principal. Algunos de estos modelos secundarios fueron incluidos dentro del modelo principal como descripciones de fenómenos paralelos al proceso de biodegradación. Los demás modelos secundarios sirvieron de pruebas para conjeturas, hipótesis y demás inquietudes que fueron surgiendo a lo largo del desarrollo del modelo principal.

El primer prototipo del modelo matemático contó únicamente con 2 variables, microorganismos y fenol (sustrato), siguiendo un modelo de crecimiento poblacional típico donde el crecimiento celular está función de la concentración de fenol y determinada por la *Ecuación de Crecimiento*. Todo esto se evaluó sobre una configuración de bio-reactor a escala de laboratorio, con un volumen no mayor a diez (10) litros y tiempos de residencia pequeños (1-2 horas) comparados con la escala real.

El siguiente paso consistió en incluir los balances de compuestos presentes en el afluente a tratar: amonio (NH_3) y sulfuro (H_2S), cuya presencia constituyen una inhibición competitiva en el proceso de biodegradación de fenol. El amonio actúa como nutriente y su presencia no provoca una inhibición crítica en el sistema, más su presencia es importante en fenómenos como la estabilización del pH del agua (como agente básico), lo que justificó su permanencia dentro del sistema de ecuaciones. El sulfuro, por otra parte, provoca un marcado efecto inhibitorio sobre el crecimiento celular, aunque sus concentraciones se reducen a cero (0) debido exclusivamente al despojamiento de este hacia la atmósfera.

A continuación se escaló el modelo a una configuración de bio-reactor a escala de planta piloto, tomando como referencia uno de los bio-reactores existentes en la refinería de Barrancabermeja, con una capacidad volumétrica de ciento veinte (120) m³ y tiempos de residencia de ocho (8) a doce (12) horas, mucho más cercano a la escala real.

En este punto se incluyó el efecto de la concentración de oxígeno disuelto en el agua (O.D.) en el crecimiento celular, y la notable disminución de la velocidad de reacción y hasta muerte celular en ausencia de oxígeno en el sistema. Además, se tomaron en cuenta parámetros operacionales como las limitaciones en la capacidad de bombeo de aire, la eficiencia del sistema de inyección (boquillas inyectoras y difusoras) y la capacidad del agua utilizada en los bio-reactores para solubilizar el oxígeno inyectado. Es necesario remarcar la complejidad físico-química que representa este último punto del submodelo de oxígeno, dado que es casi completamente empírico, y se realizó con base en experimentos llevados a cabo previamente y durante el desarrollo de este proyecto.

A continuación, se desarrolló un segundo escalamiento, a una escala real. El modelo en este punto solo simulaba una (1) de las tres (3) etapas en serie con las que cuenta el sistema. El bio-reactor simulado tiene una capacidad volumétrica de siete mil seiscientos (7600) m³, con tiempos de residencia que varía entre doce (12) a treinta y seis (36) horas, dependiendo del flujo de alimentación al sistema.

Se incluyó posteriormente el efecto del pH en el crecimiento de la biomasa, y complementariamente la determinación analítica del pH y las variaciones sobre este como una función de las concentraciones de los diferentes compuestos activos presentes en el agua que afectan el pH, además de la biodegradación misma del fenol.

Por último se realizó un último escalamiento a tres (3) etapas en serie. Las dos nuevas etapas cuentan cada una con capacidades volumétricas superiores a los catorce mil (14000) m³, más no cuentan con ningún sistema de aireación. El sistema de ecuaciones descriptivo para cada una de las dos nuevas etapas es el mismo que para la primera etapa simulada, con las debidas correcciones en los flujos de entrada y salida para cada etapa. El efluente de la tercera etapa es la salida general del sistema.

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) resultante del desarrollo de cada prototipo fueran resueltas utilizando métodos numéricos de reducción por diferencias finitas con paso hacia la derecha.

La plataforma escogida para el desarrollo de los prototipos fue *MATLAB 6.5 Release 13* dada su alto desempeño numérico, crítico a la hora de resolver modelos matemáticos diferencias, además de la facilidad para presentar resultados de manera rápida y efectiva.

Debido que estaba contemplado desde el inicio del proyecto contener el modelo matemático fina en una interfaz práctica y útil para el usuario final, se optó por utilizar al mínimo las funciones de solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias dado que estas se comportarían como cajas negras al momento de hacer la implementación en el lenguaje de programación escogido. Es por esto que los códigos utilizados para resolver el sistema de ecuaciones solo utilizan diferencias finitas, las cuales son fácilmente traducidas a un lenguaje de programación de propósito general.

4.2. DATOS EXPERIMENTALES

El ICP y los laboratorios en planta en GCB proveyeron una serie de registros y muestreos de las variables registradas identificadas desde el inicio del proyecto, muestreos de corridas experimentales a escala piloto, y del seguimiento al bio-reactor real. Estas mediciones comprendían un periodo de algo más de un año y fueron nuestra principal fuente de información (datos experimentales) para el desarrollo de los modelos matemáticos.

Estas tablas de datos presentaban diferentes tipos de fallas, como errores de medición, ya sea por error del equipo utilizado para realizar la medición, o simplemente error humano. En algunos casos nos encontrábamos con tablas incompletas debido a que no tenían un registro temporal suficiente, o bien las variables registradas no eran suficientes.

Por estas y otras razones se realizó durante todo el desarrollo del proyecto un análisis y revisión de las tablas de registros dadas por el ICP y GCB, sometiéndolas a un análisis de observación directa, un ligero tratamiento estadístico, y en algunos casos se aplicaron métodos de interpolación.

No se creyó conveniente hacer un tratamiento estadístico riguroso dado que las mediciones que se pudieron haber catalogado como erróneas pueden corresponder a picos de las concentraciones en el afluente debido a fallas en los equipos de la refinería *aguas arriba*. De haber aplicado un método estadístico riguroso se habrían obviado condiciones de excepción, pero reales, que se presentan en planta.

4.3. MODELOS PROTOTIPO

A continuación se presenta la lista de modelos desarrollados en la línea principal, así como los modelos secundarios que fueron incluidos. La notación de los modelos corresponde al nivel de ejecución del proyecto y fue adjudicada de manera arbitraria por el autor.

4.3.1. Primer Modelo: *SimV1*

El modelo *simV1*, como su numeración lo indica, fue el inicio del desarrollo matemático y por tanto el más sencillo de todos. Su objetivo fue ayudar a discernir sobre el mejor modelo cinético a utilizar para la continuación del proyecto: modelo cinético de Haldane o Monod.

Las dos únicas variables de estudio fueron la biomasa (variable x) y la concentración de fenol (variable S), tanto para modelos de cinética Monod y Haldane (variable u).

Además, incluye un inicio de la simulación en modalidad *batch* y un posterior cambio a continuo cuando la concentración de fenol en el tiempo i (variable S_i) es menor o igual a la mitad de la concentración inicial de fenol (variable S_0).

La configuración del bio-reactor está para un tanque pequeño, 10 L, y un flujo de 1 L/h, lo cual corresponde a condiciones de laboratorio.

El modelo matemático que describe el prototipo *simV1* es el siguiente:

Tabla 7: Prototipo SimV1

Ecuación cinética tipo Monod:	$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{K_S + S} \quad (27)$
Ecuación cinética tipo Haldane:	$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{K_S + S + \frac{S^2}{K_f}} \quad (28)$
Balance de biomasa (<i>batch</i>):	$\frac{dx}{dt} = \mu * x \quad (29)$
Balance de biomasa (continuo):	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} \right) x \quad (30)$
Balance de fenol (<i>batch</i>):	$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu * x}{Y_{x/S}} \quad (31)$
Balance de fenol (continuo):	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}} \quad (32)$

Figura 12. Modelo SimV1 (*Batch*)

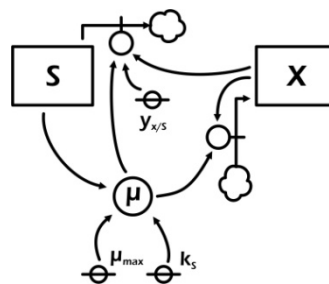


Figura 13. Modelo SimV1 (Continuo)

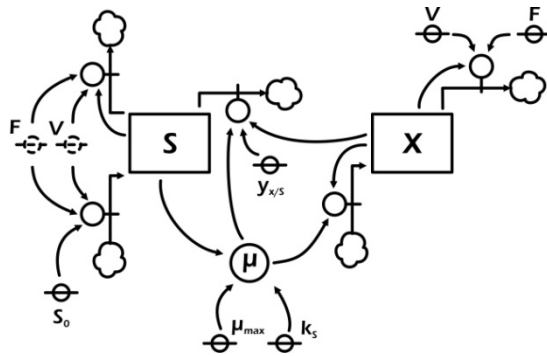


Figura 14. Simulación *batch/continuo* con un modelo cinético Monod

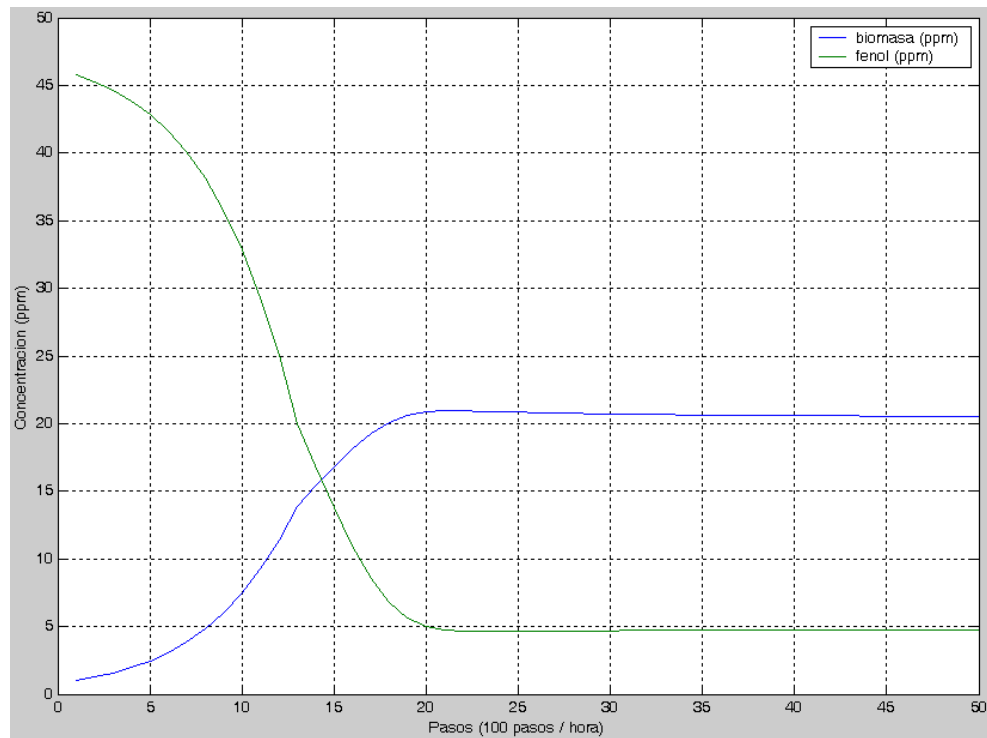
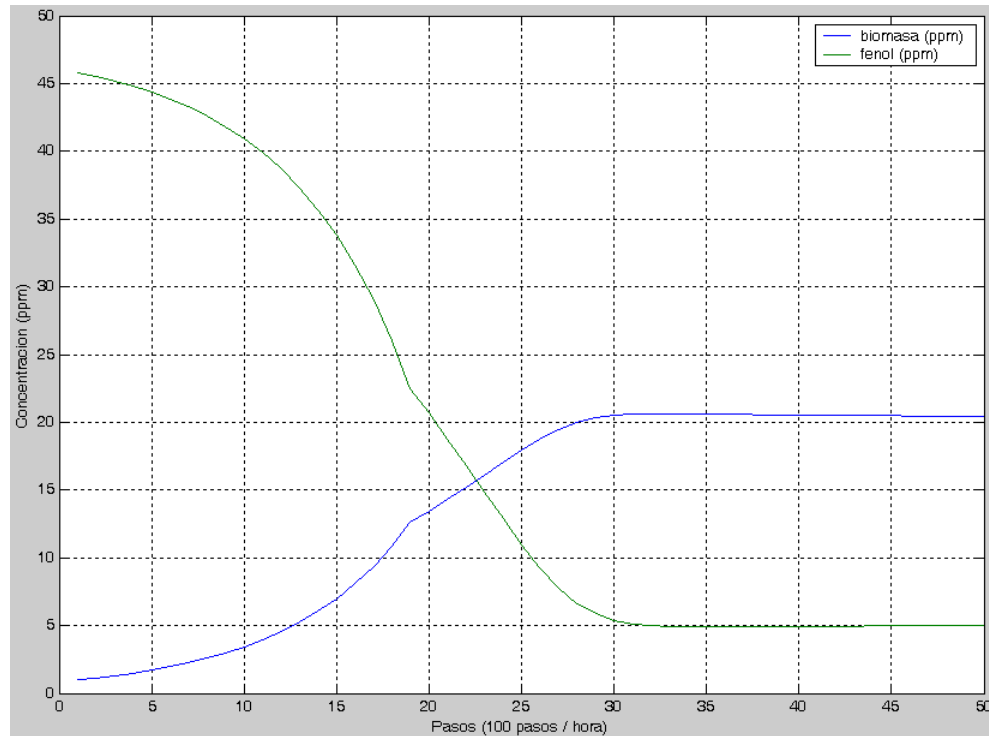


Figura 15. Simulación *batch*/continuo con un modelo cinético Haldane



4.3.2. Segundo Modelo: *simV2*

Se incluye en el modelo el balance de la concentración de amonio NH_3 (variable N), y su efecto inhibitorio sobre la biodegradación del fenol.

Se mantiene una configuración de bio-reactor de laboratorio, solo en estado continuo.

Para apreciar mejor el efecto inhibitorio del amonio, se preparan dos conjuntos de ecuaciones, con y sin efecto inhibitorio, que se presentan lado a lado en las gráficas de resultados para apreciar el retraso en la biodegradación del fenol a diferentes concentraciones de entrada de amonio.

El modelo matemático es el siguiente:

Tabla 8: Prototipo SimV2

Ecuación cinética:	$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH_3}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}} \quad (33)$
--------------------	---

Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} \right) x$	(34)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$	(35)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH3}}$	(36)

Figura 16. Modelo SimV2

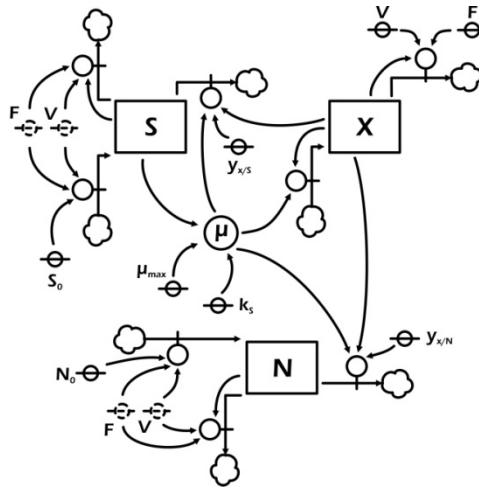


Figura 17. Simulación con 40 ppm de amonio en el afluente.

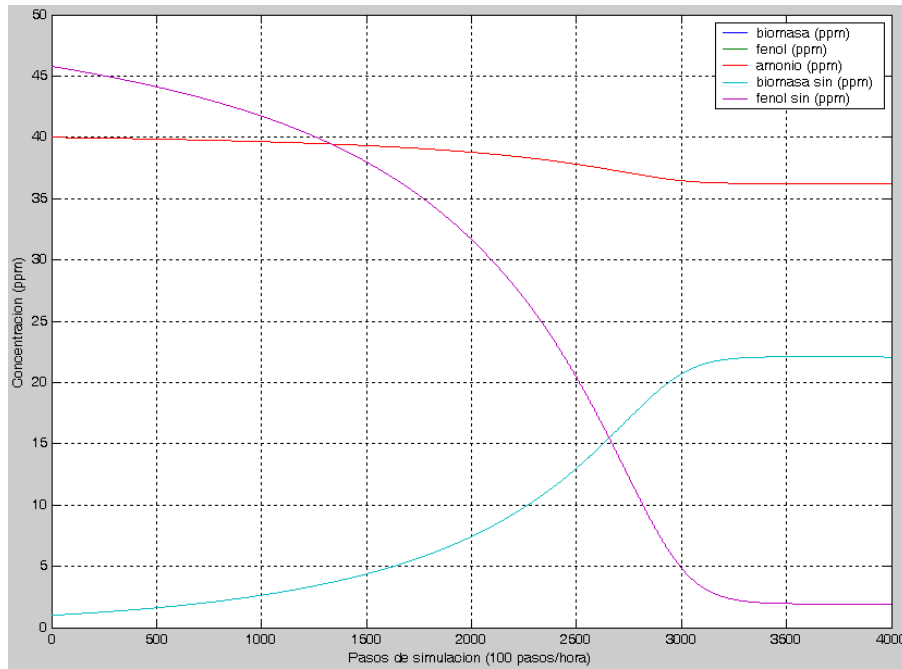
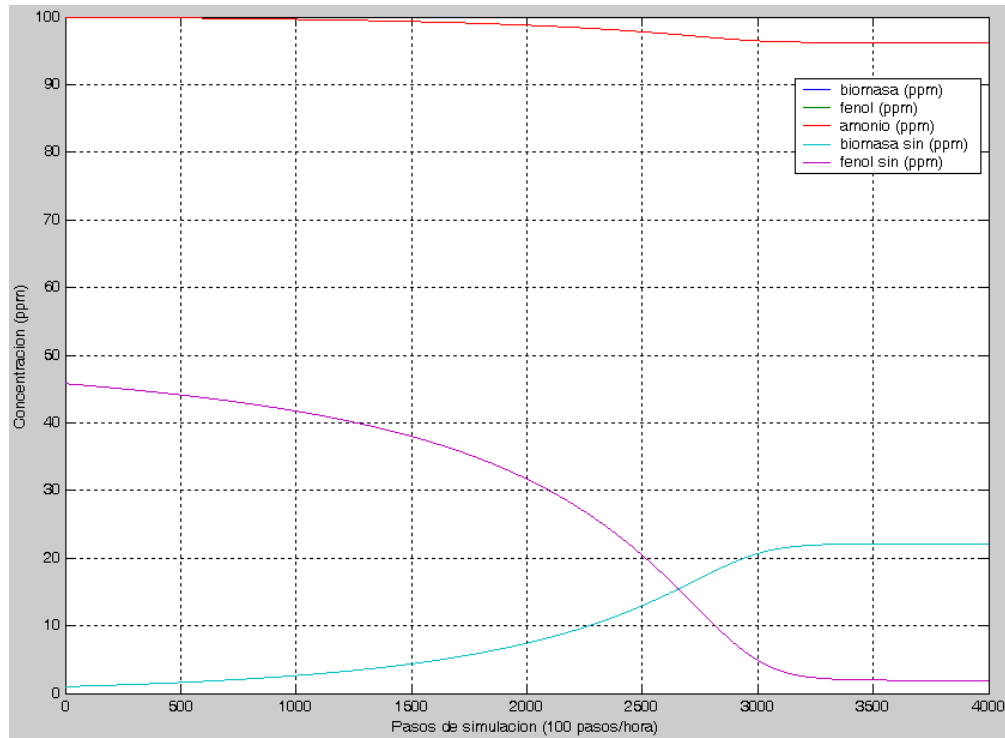


Figura 18. Simulación con 100 ppm de amonio en el afluente.



4.3.3. Tercer Modelo: *simV3*

Se incluye en el modelo el balance de la concentración de sulfuro H_2S (variable H), y su efecto inhibitorio sobre la biodegradación del fenol. A diferencia del fenol y del amonio, el sulfuro no es biodegradado por la biomasa, éste se despoja a la atmósfera a razón de una relación K , determinada de forma empírica.

Se utiliza una configuración de bio-reactor a escala de planta piloto, volumen de 120 m^3 , y flujo de entrada y salida de $6700 \text{ m}^3/\text{h}$.

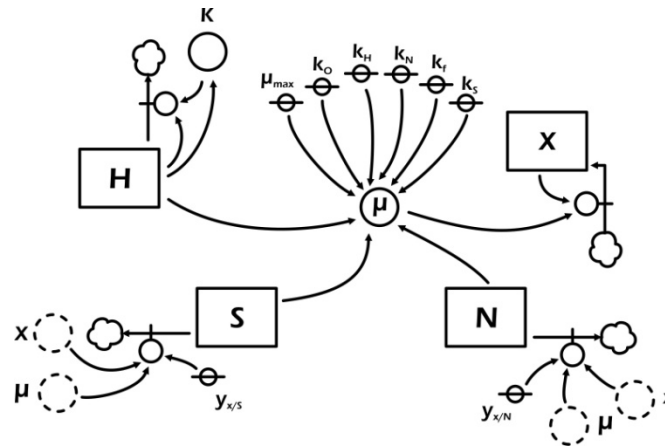
De nuevo se hace una comparación del sistema de ecuaciones sometiendo el modelo a una configuración del bio-reactor en *batch* y en continuo.

El modelo matemático para el sistema en *batch* es el siguiente:

Tabla 9: Prototipo SimV3 en batch

Ecuación cinética:	$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{K_S \left(1 + \frac{N}{K_{NH_3}}\right) \left(1 + \frac{H}{K_{H_2S}}\right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$ (37)
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \mu * x$ (38)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$ (39)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = -\frac{\mu * x}{Y_{x/NH_3}}$ (40)
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = -K * H$ $K = 427.19 H o^{-1.6648}$ (41)

Figura 19. Modelo SimV3 en batch



El modelo matemático para el sistema en continuo es el siguiente:

Tabla 10: Prototipo SimV3 en continuo

Ecuación cinética:	$\mu = \frac{\mu_{\max} * S}{K_S \left(1 + \frac{N}{K_{NH_3}}\right) \left(1 + \frac{H}{K_{H_2S}}\right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$ (42)
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V}\right) x$ (43)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V}\right) - \left(\frac{F * S}{V}\right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$ (44)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V}\right) - \left(\frac{F * N}{V}\right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH_3}}$ (45)
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V}\right) - \left(\frac{F * H}{V}\right) - K * H$ (46) $K = 427.19 H_0^{-16648}$

Figura 20. Modelo SimV3 en continuo

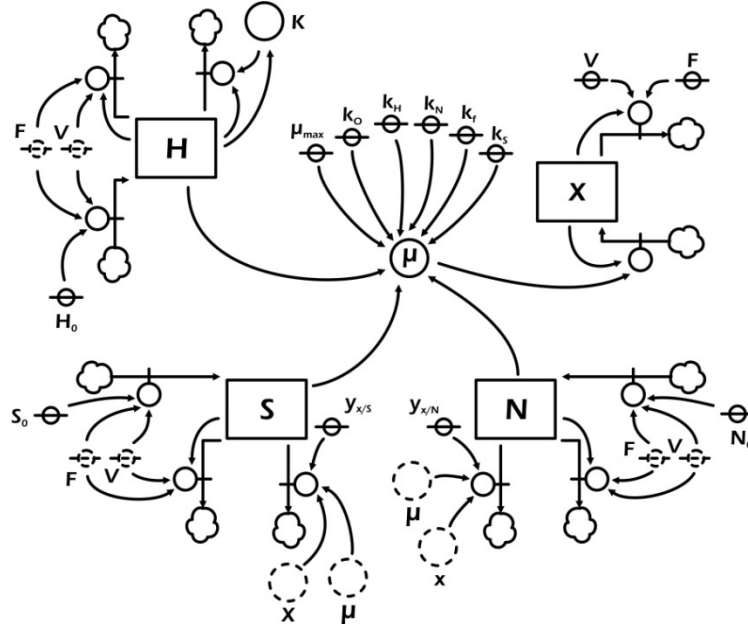
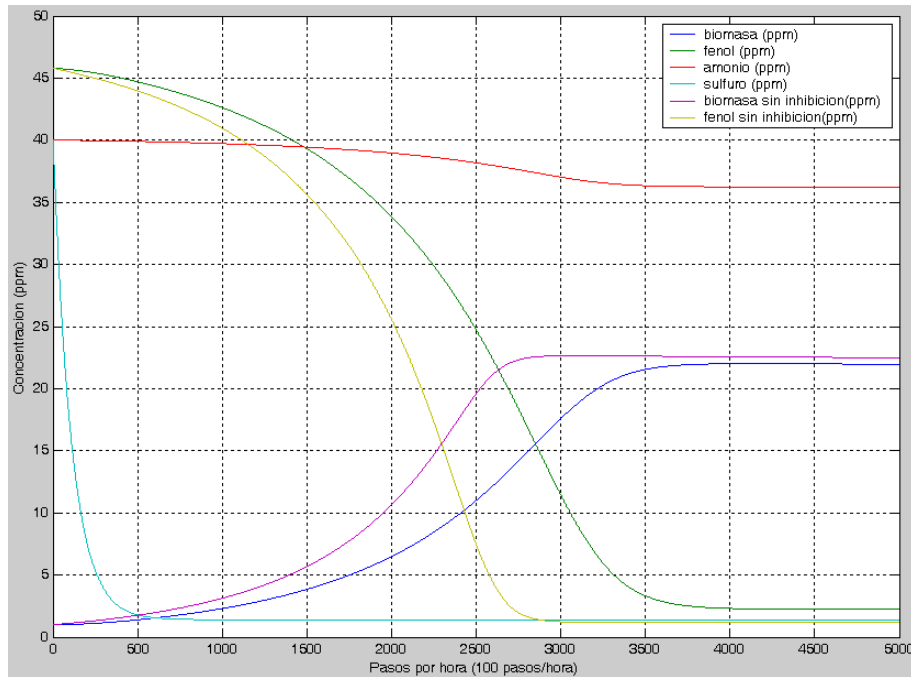


Figura 21. Comparación del modelo con y sin el efecto inhibitorio del sulfuro (40 ppm)



4.3.4. Cuarto Modelo: *simV4*

Se incluye en el modelo el balance de la concentración de oxígeno disuelto en el agua (variable **O**), y su efecto limitante sobre el crecimiento celular, descrito en la ecuación cinética. El modelo de oxígeno sigue un modelo Monod Simple. La capacidad de oxigenación depende del *Coefficiente Volumétrico de Transferencia de Masa*, $K_L a$, la cuál para este modelo se toma como una constante. Además existe la limitación de una concentración límite de oxígeno disuelto en el agua, **C**, el cuál limita la cantidad de oxígeno que se puede solubilizar en el agua en un tiempo determinado.

Se considera además una concentración de oxígeno en el afluente, pero esta es muy pequeña como para poder abastecer la demanda de oxígeno requerida por la biomasa

Se sigue manteniendo una configuración de bio-reactor a escala de planta piloto.

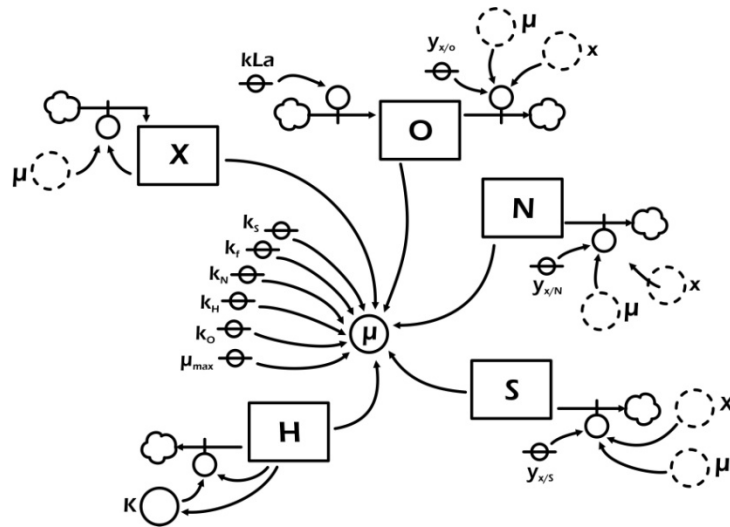
De nuevo se hace una comparación del sistema de ecuaciones sometiendo el modelo a una configuración del bio-reactor en *batch* y en continuo.

El modelo matemático para el sistema en *batch* es el siguiente:

Tabla 11: Prototipo SimV4 en batch

Ecuación cinética	$\mu = \mu_{\max} * \left(\frac{O}{O + K_o} \right) * \frac{S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH3}} \right) \left(1 + \frac{H}{K_{H2S}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$	(47)
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \mu * x$	(48)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$	(49)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH3}}$	(50)
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = -K * H$ $K = 427.19 H o^{-16648}$	(51)
Balance de oxígeno:	$\frac{dO}{dt} = kLa(C - O) - \frac{\mu * x}{Y_{x/O}}$	(52)

Figura 22. Modelo SimV4 en batch



El modelo matemático para el sistema en continuo es el siguiente:

Tabla 12: Prototipo SimV4 en continuo

Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} \right) x$	(53)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$	(54)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH_3}}$	(55)
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H}{V} \right) - K * H$ $K = 427.19Ho^{-16648}$	(56)
Balance de oxígeno:	$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F * O_0}{V} \right) - \left(\frac{F * O}{V} \right) + kLa(C - O) - \frac{\mu * x}{Y_{x/O}}$	(57)

Figura 23. Modelo SimV4 en continuo

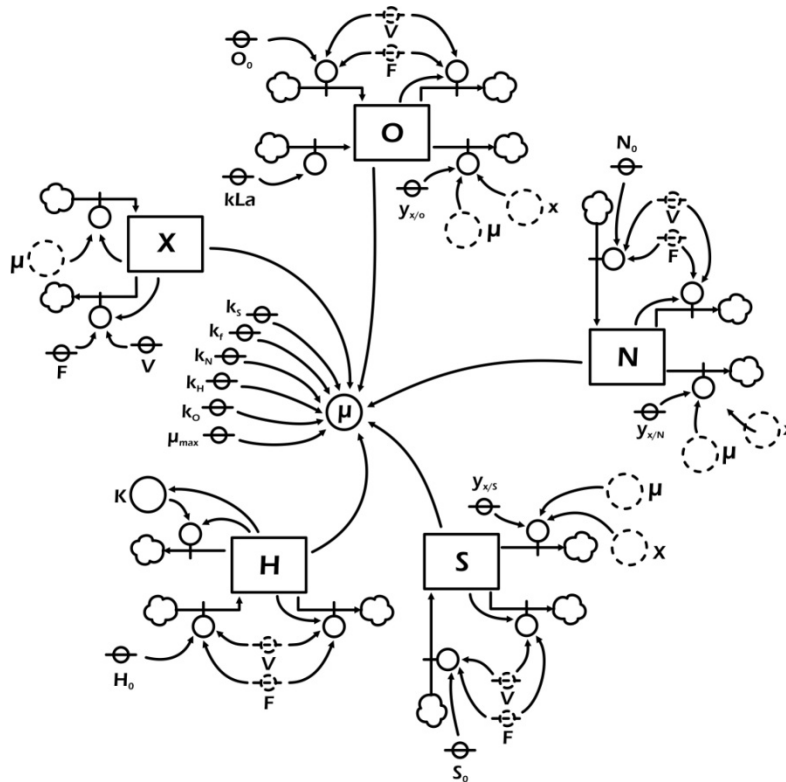


Figura 24. Simulación con el limitante de oxígeno disuelto

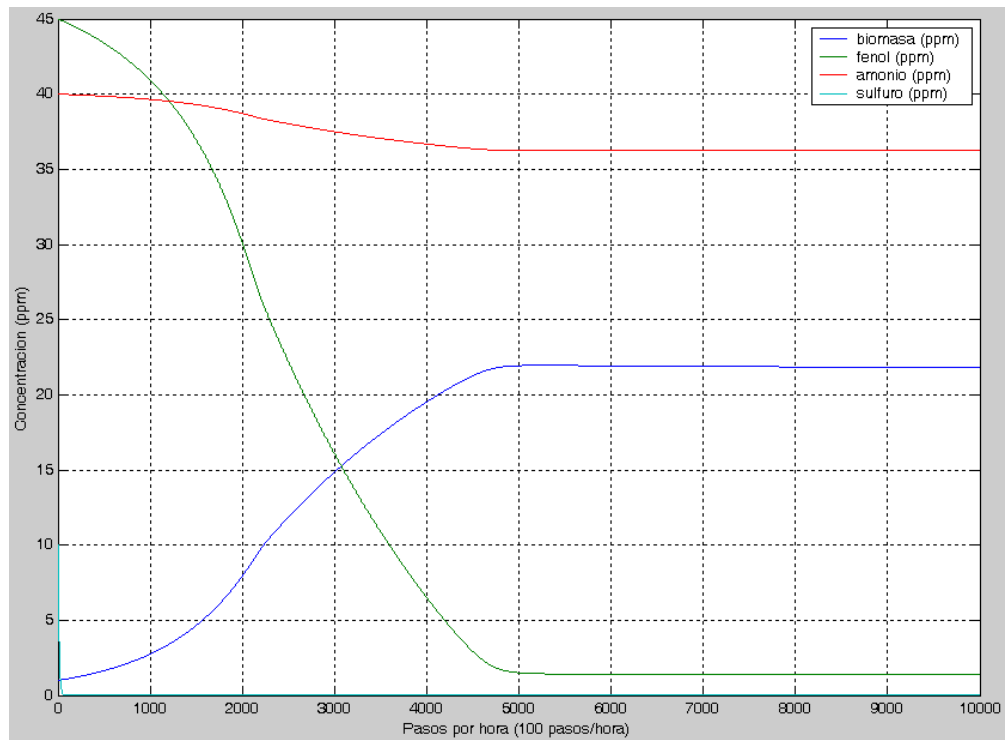
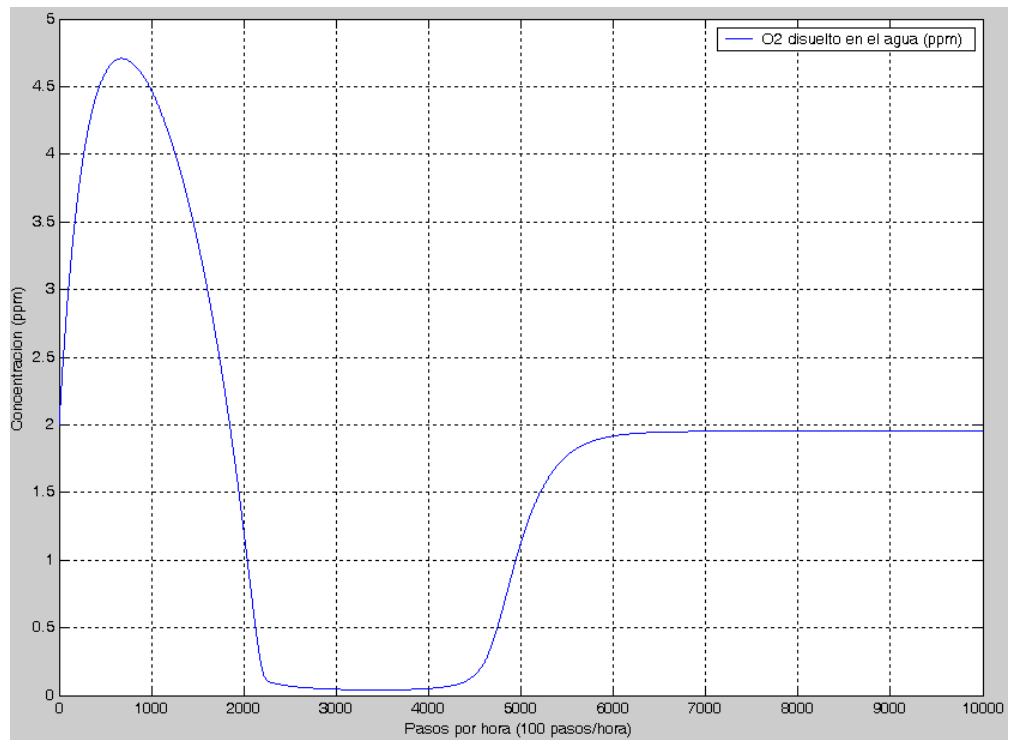


Figura 25. Perfil de oxígeno disuelto durante la simulación



4.3.5. Quinto Modelo: SimV5

En este modelo se modifica el flujo de entrada de oxígeno por aireación, estableciéndolo en función del oxígeno inyectado (21% de O₂ presente en el aire inyectado), y de la cantidad y eficiencia de las boquillas eyectoras en operación. El coeficiente volumétrico de transferencia, **kLa**, se calcula también en función del oxígeno inyectado.

Además se modifica la ecuación cinética en función del pH del afluente, haciendo cero (0) el valor de la velocidad de máxima de reacción si el valor del pH se encuentra fuera del intervalo establecido para el crecimiento celular.

Este es el primer modelo que utiliza una configuración de bio-reactor a escala real, aunque solo utiliza la primera de los tres (3) etapas que se encuentra en campo, cuya capacidad volumétrica es de 7600 m³ y recibe un flujo cercano a los 800 m³/h.

El modelo matemático para el sistema es el siguiente:

Tabla 13: Prototipo SimV5

Ecuación cinética:	$\mu = \mu_i * \left(\frac{O}{O + K_o} \right) * \frac{S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH_3}} \right) \left(1 + \frac{H}{K_{H_2S}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}} \quad (58)$ <p><i>u_i = 0 si el pH de entrada está fuera del intervalo definido</i> <i>sino, u_i = u_{max}</i></p>
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} \right) x \quad (59)$
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}} \quad (60)$
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH_3}} \quad (61)$
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H}{V} \right) - K * H \quad (62)$ <p><i>K = 427.19Ho⁻¹⁶⁶⁴⁸</i></p>
Balance de oxígeno:	$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F * O_0}{V} \right) - \left(\frac{F * O}{V} \right) + oR - \frac{\mu * x}{Y_{x/O}} \quad (63)$

si la oferta de oxígeno es menor que la capacidad de absorción del agua, se transfiere todo el oxígeno ofertado

$$\text{Oxígeno inyectado} = \text{Aire inyectado} * \left(\frac{\text{Boquillas operando}}{\text{Boquillas Totales}} \right) * 0,21 * 1,02$$

$$oR = \text{Oxígeno inyectado} * \text{eficiencia} / \text{volumen}$$

si la oferta de oxígeno supera la capacidad de absorción del agua, se transfiere solo lo que es posible

$$oR = \text{capacidad de absorción} = kLa * (C - O)$$

C = concentración de saturación de oxígeno disuelto en el agua

$$kLa = 0,0046 * \text{Oxígeno inyectado}$$

Figura 26. Modelo SimV5

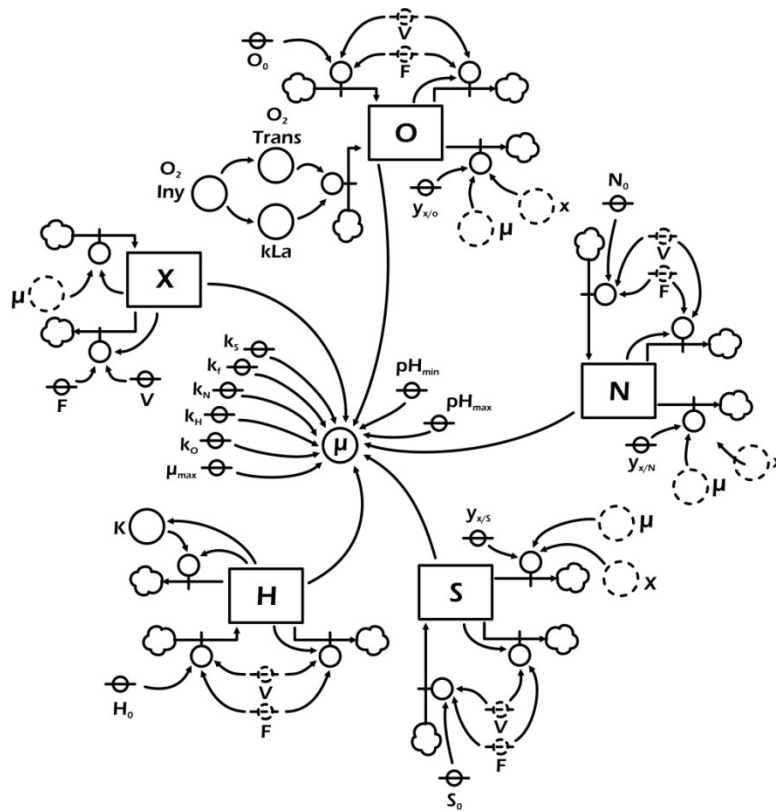


Figura 27. Simulación con limitante de inyección de aire (645 m³/h)

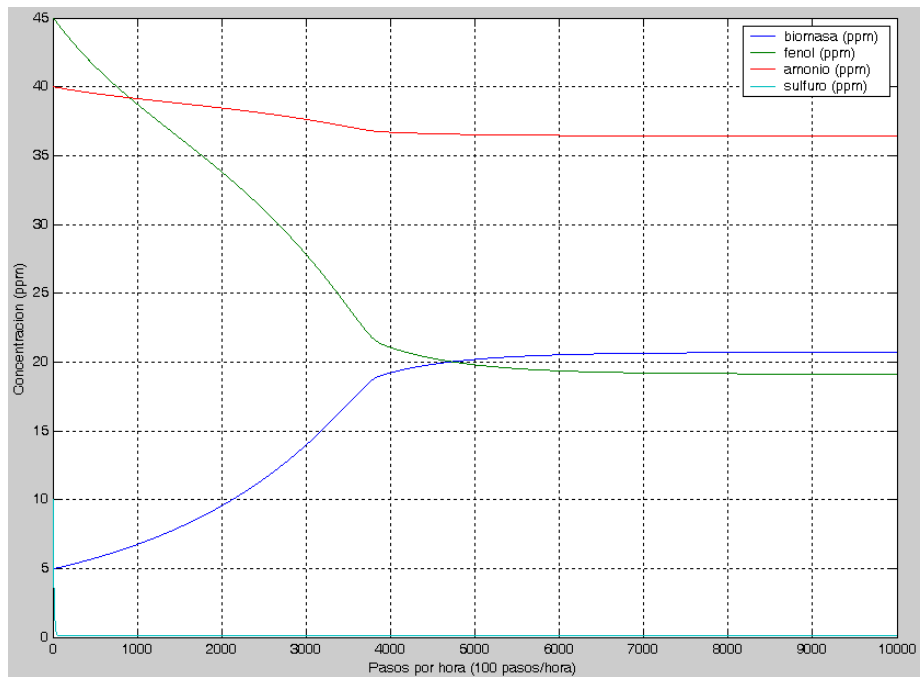
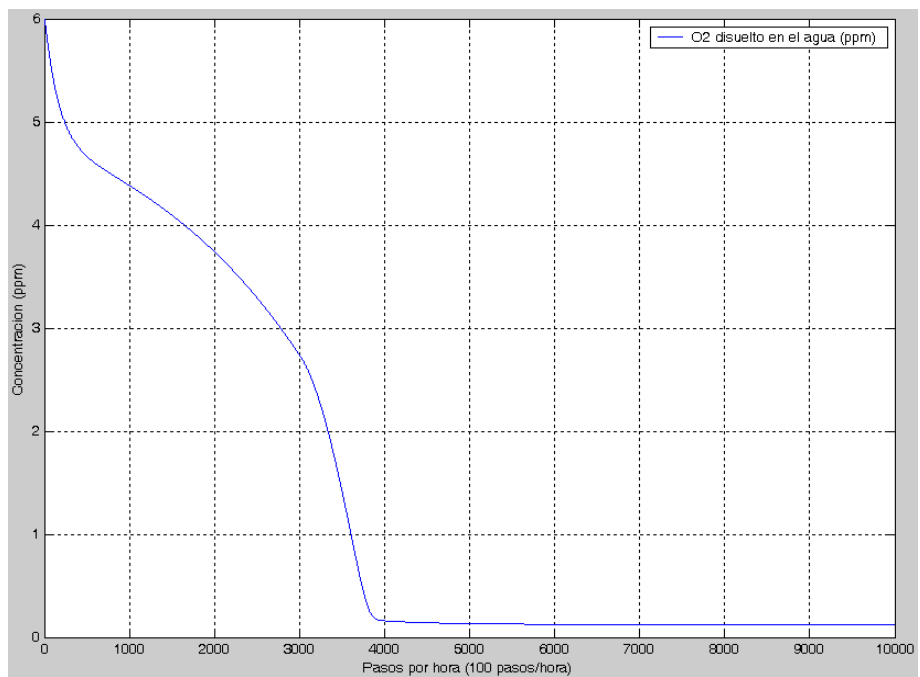


Figura 28. Perfil de oxígeno disuelto



4.3.6. Sexto Modelo: *simV6*

En este modelo se incluye el balance de la concentración de hidrogeniones (H_3O^+) presentes en el bio-reactor (variable **H3**), los cuales son la fuente del cálculo del pH dentro del tanque. Sus flujos de entrada son la concentración de hidrogeniones en el afluente (pH del afluente) y la cantidad de hidrogeniones producto de la biodegradación del fenol .

Se añade un multiplicador de pH (variable **p**) el cuál limitará la velocidad de biodegradación de la biomasa en función del pH dentro del bio-reactor.

La configuración del bio-reactor se mantiene a escala industrial, con solo la primera etapa del sistema.

El modelo matemático para el sistema es el siguiente:

Tabla 14: Prototipo SimV6

Ecuación cinética:	$\mu = \frac{\mu_{max}}{p} * \left(\frac{O}{O + K_o} \right) * \frac{S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH3}} \right) \left(1 + \frac{H}{K_{H2S}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$ $p = \frac{10^{-pH}}{k_1} + 1 + \frac{k_2}{10^{-pH}}$ $pH = -\log_{10} \left(\frac{H3}{PM} \right), PM_{H3O^+} = 19$ <p><i>K1 y K2 se establecen como límites operacionales del pH para un rendimiento óptimo de biodegradación</i></p>	(64)
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} \right) x$	(65)
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}}$	(66)
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH3}}$	(67)
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H}{V} \right) - K * H$ <p>$K = 427.19 H_0^{-16648}$</p>	(68)
Balance de hidrogeniones:	$\frac{dH3}{dt} = \left(\frac{F * H3_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H3}{V} \right) + \frac{\mu * x}{Y_{x/H3}}$	(69)

Balance de oxígeno:	$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F * O_0}{V} \right) - \left(\frac{F * O}{V} \right) + oR - \frac{\mu * x}{Y_{x/o}} \quad (70)$
---------------------	---

si la oferta de oxígeno es menor que la capacidad de absorción del agua, se transfiere todo el oxígeno ofertado

$$\text{Oxígeno inyectado} = \text{Aire inyectado} * \left(\frac{\text{Boquillas operando}}{\text{Boquillas Totales}} \right) * 0,21 * 1,02$$

$$oR = \text{Oxígeno inyectado} * \text{eficiencia} / \text{volumen}$$

si la oferta de oxígeno supera la capacidad de absorción del agua, se transfiere solo lo que es posible

$$oR = \text{capacidad de absorción} = kLa * (C - O)$$

C = concentración de saturación de oxígeno disuelto en el agua

$$kLa = 0,0046 * \text{Oxígeno inyectado}$$

Figura 29. Modelo SimV6

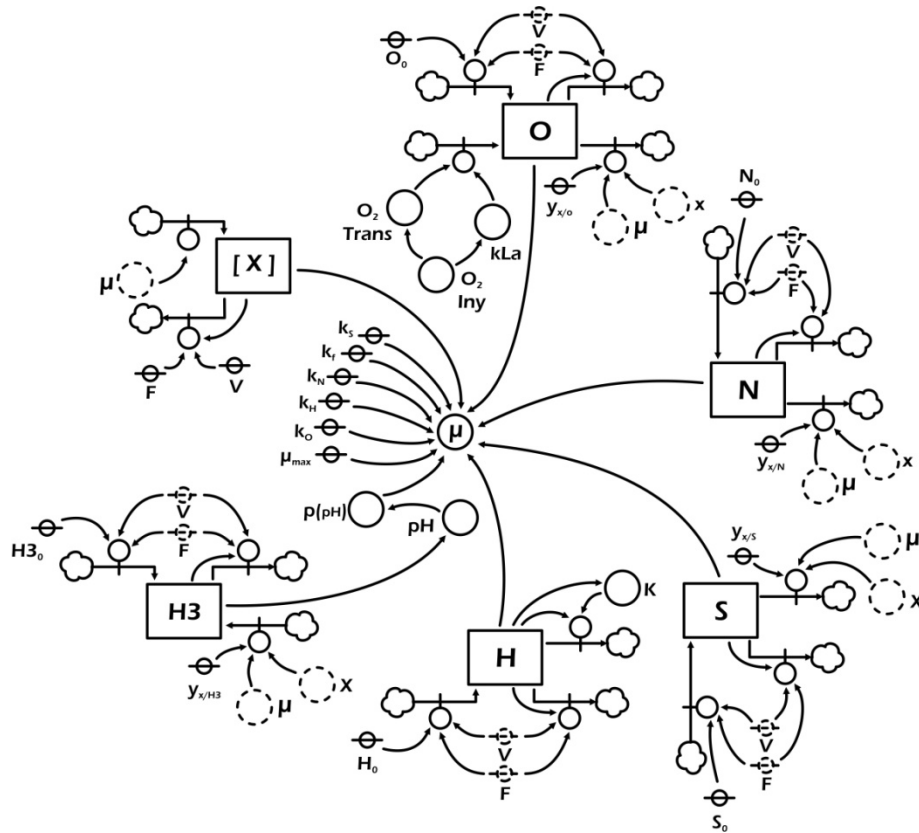


Figura 30. Simulación con limitante de pH

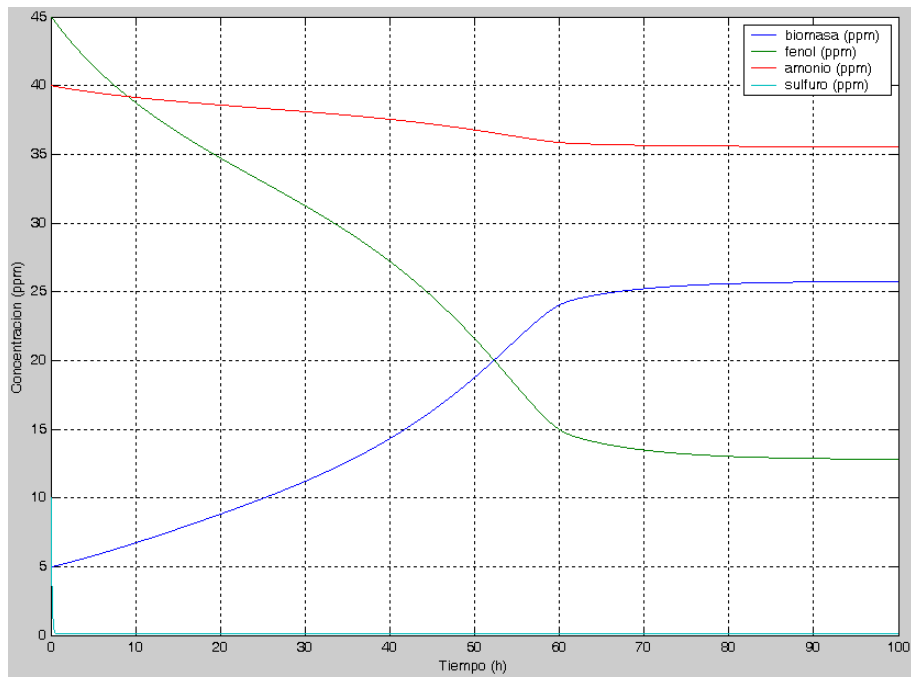
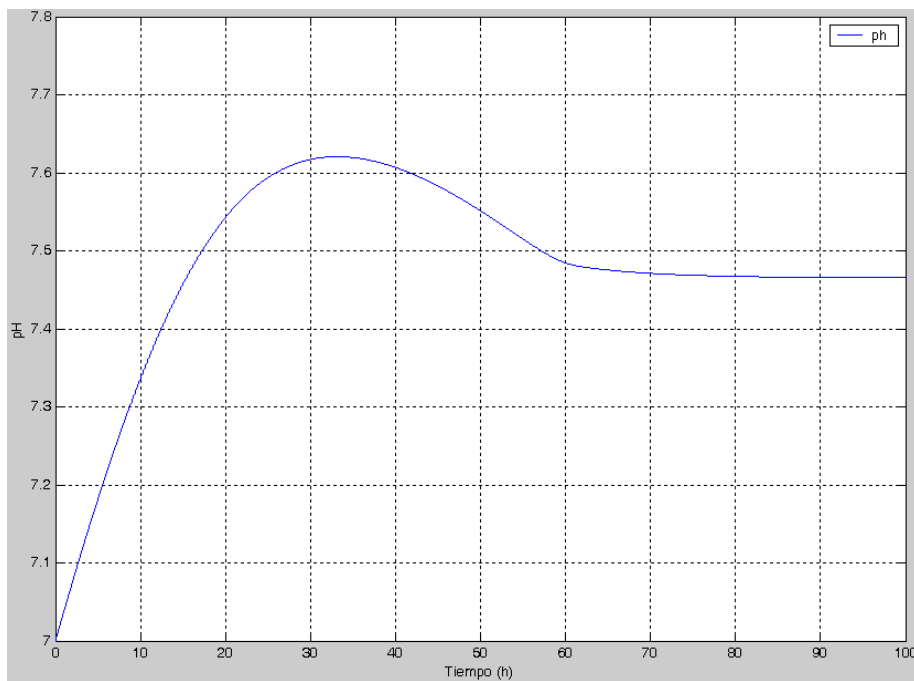


Figura 31. Perfil de pH. pH inicial = 7. pH del afluente = 8



4.3.7. Séptimo Modelo: SimV7

En este modelo se buscaba desglosar el cálculo teórico del pH, estableciendo la concentración de entrada de hidrogeniones como una función de las concentraciones en el afluente de fenol, sulfuro, amonio, y carbonato CO₃ (variable **CO3o**) de acuerdo con un balance de iones.

Se incluye la presencia de carbonato en el afluente dado su importancia al momento de determinar el valor del pH.

Se incluye también una modificación al rendimiento de producción de hidrogeniones por parte de la biomasa (variable **y_{x/H3}**) en función del pH.

Por último se agrega la tasa de mortalidad de la biomasa (variable **kmuerte**) al balance, el cuál representa la muerte natural de la biomasa.

El modelo matemático para el sistema es el siguiente:

Tabla 15: Prototipo SimV7

Ecuación cinética:	$\mu = \frac{\mu_{max}}{p} * \left(\frac{O}{O + K_o} \right) * \frac{S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH3}} \right) \left(1 + \frac{H}{K_{H2S}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$ $p = \frac{10^{-pH}}{k_1} + 1 + \frac{k_2}{10^{-pH}} \quad (71)$ $pH = -\log_{10} \left(\frac{H3}{PM} \right), PM_{H3O^+} = 19$ <p><i>K1 y K2 se establecen como límites operacionales del pH para un rendimiento óptimo de biodegradación</i></p>
Balance de biomasa:	$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} - k_{muerte} \right) x \quad (72)$
Balance de fenol:	$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/S}} \quad (73)$
Balance de amonio:	$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/NH3}} \quad (74)$
Balance de sulfuro:	$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H}{V} \right) - K * H \quad (75)$ $K = 427.19 H_o^{-16648}$

Balance de hidrogeniones:	$\frac{dH3}{dt} = \left(\frac{F * H3_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H3}{V} \right) + \frac{\mu * x}{Y_{x/H3}} \quad (76)$
<p> $\text{resultante} = \sqrt{\frac{K_{NH3} * N_0}{PM_{NH3}}} - \sqrt{\frac{2 * K_{CO3} * CO3_0}{PM_{CO3}}} - \sqrt{\frac{2 * K_{H2S} * H_0}{PM_{H2S}}} - \sqrt{\frac{K_{Fenol} * S_0}{PM_{Fenol}}}$ </p> <p> <i>si resultante < 0, la concentración de iones OH⁻ es mayor</i> $H3_0 = -\text{resultante}$ </p> <p> <i>si resultante > 0, la concentración de iones H₃O⁺ es mayor</i> </p> <p> $H3_0 = 10^{-14} / \text{resultante}$ </p> <p> <i>si resultante = 0, las concentraciones de iones son iguales</i> $H3_0 = 10^{-7}, pH = 7$ </p>	
Balance de oxígeno:	$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F * O_0}{V} \right) - \left(\frac{F * O}{V} \right) + oR - \frac{\mu * x}{Y_{x/O}} \quad (78)$
<p> <i>si la oferta de oxígeno es menor que la capacidad de absorción del agua, se transfiere todo el oxígeno ofertado</i> $\text{Oxígeno inyectado} = \text{Aire inyectado} * \left(\frac{\text{Boquillas operando}}{\text{Boquillas Totales}} \right) * 0,21 * 1,02$ </p> <p> $oR = \text{Oxígeno inyectado} * \text{eficiencia} / \text{volumen}$ </p> <p> <i>si la oferta de oxígeno supera la capacidad de absorción del agua, se transfiere solo lo que es posible</i> $oR = \text{capacidad de absorción} = kLa * (C - O)$ </p> <p> $C = \text{concentración de saturación de oxígeno disuelto en el agua}$ $kLa = 0,0046 * \text{Oxígeno inyectado}$ </p>	

Figura 32. Modelo SimV7

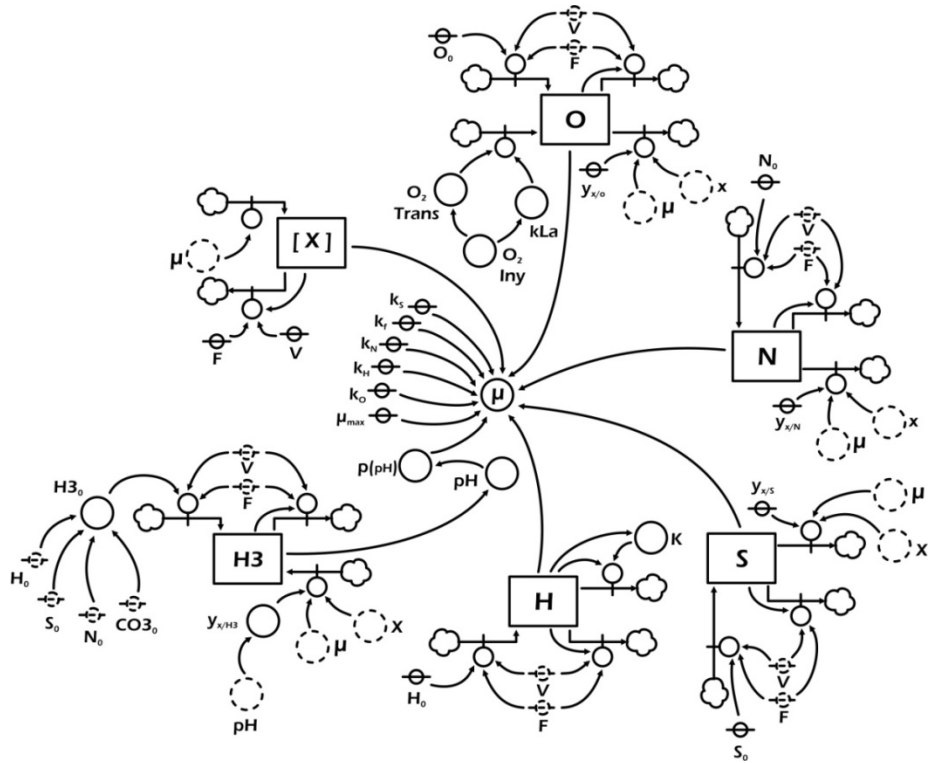
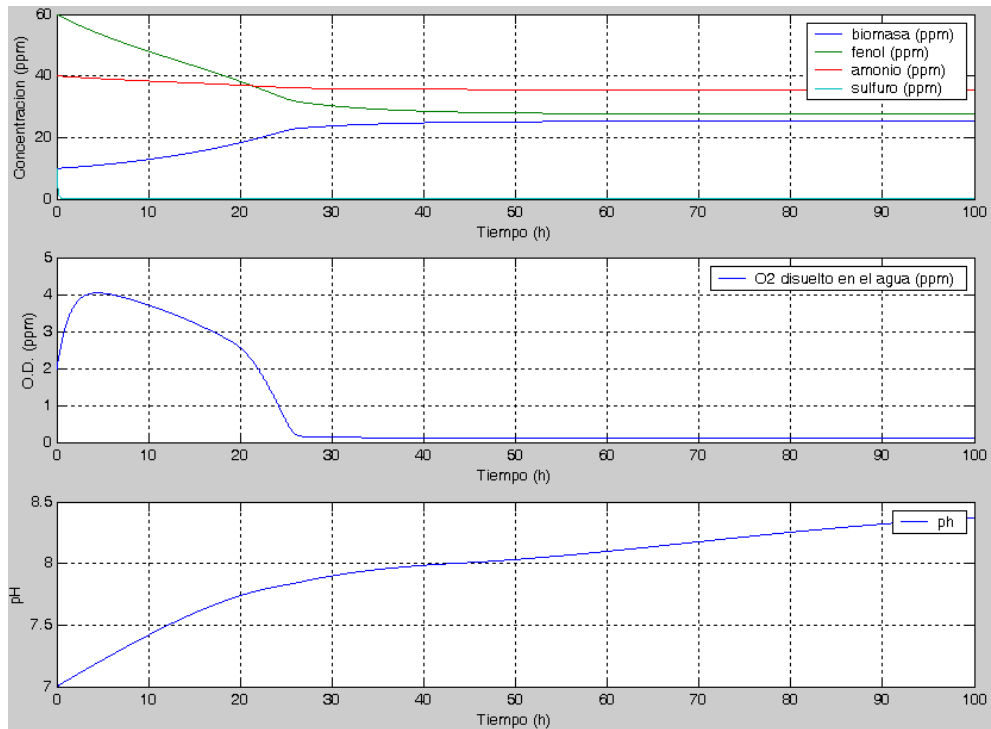


Figura 33. Simulación con un pH del afluente calculado en 10,292



4.3.8. Modelo Final: *simV7b*

Este último modelo incluye las dos etapas faltantes del sistema, con una capacidad volumétrica de 15400 m³, 14630 m³ respectivamente. Las tres etapas están dispuestas en serie, donde el efluente de la primera etapa se toma como afluente para la segunda, y el efluente de esta como afluente para la tercera y última etapa. El efluente de la tercera etapa corresponde a la corriente de salida del sistema de bio-tratamiento de aguas residuales.

En condiciones reales, la segunda y la tercera etapa del sistema no cuentan con un sistema de aireación, por lo que no existe flujo de entrada para el nivel de oxígeno. En estas etapas se tiene en cuenta la reaireación natural por la absorción de oxígeno atmosférico a través de la capa superficial de agua, lo cuál se traduce en un valor de kLa de 0,001.

El balance de oxígeno para la segunda y tercera etapa es el siguiente:

Balance de oxígeno:

$$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F^* O_0}{V} \right) - \left(\frac{F^* O}{V} \right) + 0.001(C - O) - \frac{\mu^* x}{Y_{x/O}} \quad (79)$$

El desarrollo detallado de este modelo matemático se realizará en el siguiente capítulo de este Trabajo de Grado.

5. MODELO MATEMÁTICO FINAL

El modelo final de este proyecto de investigación se precede de un extenso desarrollo de modelos prototipos consecutivos, investigación bibliográfica, y modelos empíricos basados en datos y registros tomados durante algo más de un año de seguimiento al proceso en la Planta de Tratamiento de Aguas Residuales, PTAR, de la Refinería de ECOPETROL en la ciudad de Barranca, GCB. Todo para otorgarle al modelo una fuerte base científica, matemática y académica al momento de ser evaluado y puesto a prueba.

A modo de introducción, el modelo a explicar a continuación es en sí la suma de los efectos acumulados de una serie de sub-modelos que afectan y/o limitan el tema principal a tratar: la biodegradación de fenol por parte de la biomasa.

Los sub-modelos que componen el modelo final presentado son los siguientes:

5.1. VELOCIDAD ESPECÍFICA DE CRECIMIENTO: MODELO CINETICO

La ecuación cinética, como también es llamada, es el resultado de la investigación bibliográfica así como de modelos empíricos basados en la experimentación y registro del sistema real, con tal de lograr un modelo cinético para la biodegradación de fenol.

Inicialmente esta ecuación correspondía a un modelo cinético de Haldane, más se fueron agregando diferentes comportamientos inhibitorios (amonio, sulfuro, pH) y limitantes (oxígeno disuelto)

$$\mu = \frac{\mu_{max}}{p} * \left(\frac{O}{O + K_o} \right) * \frac{S}{K_s \left(1 + \frac{N}{K_{NH3}} \right) \left(1 + \frac{H}{K_{H2S}} \right) + S + \frac{S^2}{K_f}}$$

ECUACIÓN:

$$p(pH) = \frac{10^{-pH}}{k_1} + 1 + \frac{k_2}{10^{-pH}} \quad (80)$$

$$pH = -\log_{10} \left(\frac{H3}{PM} \right), \quad PM = \text{Peso Molecular } H3O^+ = 19$$

5.1.1. Multiplicador de pH: $p(pH)$

La velocidad máxima de crecimiento está limitada en primera medida por el efecto del pH sobre la biomasa. Fuera de la ventana operacional optima, estimada entre 7,5 y 9,5 grados de pH y representada por las constantes k_1 y k_2 , la velocidad de reacción presenta una ralentización, y al alejarse más, muerte celular.

5.1.2. Modelo de Oxígeno

Otro limitante es la concentración de oxígeno disuelto en el agua (O). El *pool* de bacterias utilizado es aerobio, por lo que la presencia de oxígeno disuelto en el agua es fundamental. Al ser la concentración de oxígeno cercana a cero, se ve un cambio brusco en la pendiente de crecimiento de la biomasa, y se estabiliza cuando la concentración de oxígeno es cero.

El modelo para la limitación por oxígeno corresponde a una cinética de Monod, sustentada en pruebas a escala de planta piloto.

5.1.3. Inhibición Competitiva

Compuestos como el amonio y el sulfuro constituyen una inhibición competitiva para la biodegradación de fenol.

La biomasa necesita, además del carbono que obtiene del fenol, nitrógeno para poder reproducirse, el cuál obtiene del amonio. Por tanto se define se define este como nutriente.

Es de remarcar que el efecto de inhibición provocado por el amonio, con las concentraciones trabajadas en planta, no es importante, apenas es visible y cuantificable.

Por el contrario, en el caso del sulfuro, la presencia de este compuesto en el agua produce una fuerte inhibición en la biomasa, reduciendo considerablemente la velocidad de crecimiento.

Las concentraciones de amonio y sulfuro a las que los efectos inhibitorios son apreciables e importantes se determinan según el valor de K_{NH_3} y K_{H_2S} , respectivamente.

5.2. BALANCE DE BIOMASA

La biomasa, *pool* de bacterias del género *Pseudomona pútida* que biodegradan el fenol como fuente de alimento y energía para su reproducción, es el elemento principal y de mayor interés de todo el proyecto. Podemos decir que todo este trabajo de investigación tiene como fin controlar y prever cambios en el sistema del bio-reactor que puedan perjudicar la vida de la biomasa, y el correcto desarrollo de la biodegradación de fenol. Todos los modelos aplicados sirven de complemento para este único modelo.

La ecuación del cambio en el tiempo de la biomasa se puede dividir en tres (3) partes:

$$\frac{dx}{dt} = \text{Crecimiento} - \text{Pérdida en el efluente} - \text{Muerte} \quad (81)$$

El crecimiento de la biomasa está determinado por la ecuación cinética (μ), y la cantidad a aumentar en un tiempo i depende directamente de la concentración de la biomasa en el bio-reactor en ese instante.

$$\text{Crecimiento} = \mu * x \quad (82)$$

La pérdida de biomasa en el efluente está determinada por la tasa de dilución (F/V), y es una fracción de la concentración de la biomasa en el bio-reactor en el instante i .

$$\text{Pérdida en el efluente} = x * F/V \quad (83)$$

La muerte de la biomasa está determinada por su *tasa de muerte natural*, calculada a partir de datos experimentales.

$$\text{Muerte} = k_{\text{muerte}} * x \quad (84)$$

Es de resaltar el caso cuando el crecimiento de la biomasa es inferior a la tasa de dilución, se presenta un fenómeno considerado como *Lavado*, donde se pierde biomasa en el flujo de salida antes de que esta pueda llegar a reproducirse. La solución más inmediata sería reducir el flujo de entrada/salida y/o reducir los efectos inhibitorios sobre la biomasa.

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de la biomasa.

ECUACIÓN:
$$\frac{dx}{dt} = \left(\mu - \frac{F}{V} - k_{\text{muerte}} \right) x \quad (85)$$

5.3. BALANCE DE FENOL

El balance de fenol es el primer indicador del estado de la biomasa, dado que esta depende casi totalmente del fenol para reproducirse. Cualquier alteración en el ambiente, positiva o negativa, se verá reflejada en los niveles de salida de fenol.

La ecuación del cambio en el tiempo del fenol se puede dividir en tres (3) partes:

$$\frac{dS}{dt} = \text{Concentración en el afluente} - \text{Pérdida en el fluyente} - \text{Biodegradación} \quad (86)$$

La concentración de fenol en el afluente es el único elemento que suma en el balance. La cantidad de fenol que entra al sistema está determinada por la concentración en el afluente S_0 en el tiempo i , y la tasa de dilución. La concentración en el afluente puede ser

constante, para fines de desarrollo, o constante, representando condiciones reales de funcionamiento en planta.

$$\text{Concentración en el afluente} = \frac{F * S_0}{V} \quad (87)$$

La pérdida en el efluente se determina de la misma manera que para la biomasa, en función de la concentración de fenol en el tiempo i y la tasa de dilución.

$$\text{Pérdida en el efluente} = \frac{F * S}{V} \quad (88)$$

La biodegradación de fenol está ligada al crecimiento de la biomasa, es por esto que se incluye el término *Crecimiento* del balance de biomasa en la ecuación, pero sujeto a un rendimiento $Y_{x/s}$ que determina la cantidad de unidades de fenol consumidas por una unidad de biomasa al crecer y reproducirse.

$$\text{Biodegradación} = \frac{\mu * x}{Y_{x/s}} \quad (89)$$

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de fenol.

ECUACIÓN:

$$\frac{dS}{dt} = \left(\frac{F * S_0}{V} \right) - \left(\frac{F * S}{V} \right) - \frac{\mu * x}{Y_{x/s}} \quad (90)$$

5.4. BALANCE DE AMONIO

Aunque se ha dicho que la inhibición competitiva que constituye la presencia de amonio no es tan importante como lo es la presencia de sulfuro, el amonio presenta un papel importante en la variación del pH del agua.

La ecuación del cambio en el tiempo de amonio tiene el mismo comportamiento que la ecuación de fenol:

$$\frac{dN}{dt} = \text{Concentración en el afluente} - \text{Pérdida en el efluente} - \text{Consumo biomasa} \quad (91)$$

$$\text{Concentración en el afluente} = \frac{F * N_0}{V} \quad (92)$$

$$\text{Pérdida en el efluente} = \frac{F * N}{V} \quad (93)$$

La biodegradación de amonio está ligada al crecimiento de la biomasa, al igual que para el fenol. El rendimiento Y_{x/NH_3} determina la cantidad de unidades de amonio consumidas por una unidad de biomasa al crecer y reproducirse.

$$\text{Consumo por la Biomasa} = \frac{\mu^* x}{Y_{x/NH_3}} \quad (94)$$

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de amonio.

ECUACIÓN:

$$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{F * N_0}{V} \right) - \left(\frac{F * N}{V} \right) - \frac{\mu^* x}{Y_{x/NH_3}} \quad (95)$$

5.5. BALANCE DE SULFURO

La sola presencia de sulfuro en el agua a tratar provoca la inhibición de la biomasa, interrumpiendo el proceso de biodegradación del fenol, hasta que los niveles de sulfuro en el tanque disminuyan ya sea debido a su dilución en la corriente de salida, o debido al despojamiento de este hacia la atmósfera.

La ecuación del cambio en el tiempo de sulfuro tiene el mismo comportamiento que la ecuación de amonio y fenol respecto a las concentraciones en el afluente y efluente, con la diferencia que el sulfuro no es consumido por la biomasa.

$$\frac{dH}{dt} = \text{Concentración en el afluente} - \text{Pérdida en el efluente} - \text{Despojamiento} \quad (96)$$

$$\text{Concentración en el afluente} = \frac{F * H_0}{V} \quad (97)$$

$$\text{Pérdida en el efluente} = \frac{F * H}{V} \quad (98)$$

El sulfuro se despoja de manera natural a la atmósfera a una tasa constante K , obtenida de manera empírica en base a registros de planta. Esta es la principal forma por la que la concentración de sulfuro en el tanque desaparece.

$$\begin{aligned} \text{Despojamiento} &= K * H \\ K &= 427.19 H_0^{-1.6648} \end{aligned} \quad (99)$$

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de sulfuro.

ECUACIÓN:

$$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{F * H_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H}{V} \right) - K * H \quad (100)$$

$$K = 427.19 Ho^{-1.6648}$$

5.6. BALANCE DE OXÍGENO

Al ser el proceso de biodegradación de fenol un proceso aerobio, la capacidad para suplir la demanda de oxígeno por parte de la biomasa se vuelve un elemento crucial al momento de mantener las condiciones óptimas para la biomasa. Aunque la solución ideal sería proporcionar todo el oxígeno posible, este representa una gran inversión tanto en compra de equipos como gasto de funcionamiento. Además, la demanda de oxígeno no es constante en el tiempo, esta varía según varíen las concentraciones de los diferentes elementos en el tanque. Debido a esto que una estimación de la demanda de oxígeno es importante.

La ecuación del cambio en el tiempo de la concentración de oxígeno disuelto (O.D.) en el agua se puede dividir en cuatro (4) partes:

$$\frac{dO}{dt} = \text{Concentración en el afluente} - \text{Pérdida en el afluente} + \text{Aireación} - \text{Consumo biomasa} \quad (101)$$

$$\text{Concentración en el afluente} = \frac{F * O_0}{V} \quad (102)$$

$$\text{Pérdida en el efluente} = \frac{F * O}{V} \quad (103)$$

La cantidad de oxígeno máxima que se puede inyectar al sistema está limitada por la capacidad de la bomba de inyección de aire, así como por el número de boquillas difusoras en funcionamiento.

$$\text{Oxígeno inyectado} = \text{Aire inyectado} * \left(\frac{\text{Boquillas operando}}{\text{Boquillas Totales}} \right) * 0,21 * 1,02 \quad (104)$$

$$oR = \text{Oxígeno inyectado} * \text{eficiencia} / \text{volumen}$$

Ahora, la demanda de oxígeno no siempre es constante debido a que los niveles de biomasa varían, al igual que la velocidad de crecimiento. Se presenta entonces el caso cuando se inyecta más oxígeno de lo que el agua puede absorber. De datos experimentales se obtiene entonces una concentración de saturación de oxígeno disuelto en el agua, **C**, y un coeficiente de transferencia de masa, **kLa**, los cuales dictaminan la cantidad de oxígeno que puede ingresar al sistema en un momento dado.

$$\begin{aligned} \text{capacidad de absorción} &= kLa*(C-O) \\ kLa &= 0,0046*\text{Oxígeno inyectado} \end{aligned} \quad (105)$$

Si la oferta máxima de oxígeno supera la capacidad de absorción del agua, pues se toma la primera como la cantidad efectiva a transferir.

$$oR = \text{capacidad de absorción} = kLa*(C-O) \quad (106)$$

Si ese no es el caso, es decir, la capacidad de absorción supera la oferta de oxígeno, se transfiere el máximo de la oferta.

En el caso de la segunda y tercera etapa el balance de oxígeno es diferente dado que estas etapas no cuentan con un sistema de aireación, por lo que este término es reemplazado por la absorción por difusión de oxígeno atmosférico a través de la capa superficial de agua.

$$oR = 0.0001(C - O) \quad (107)$$

El consumo de oxígeno por parte de la biomasa está determinado por el crecimiento de la biomasa, y un rendimiento $Y_{x/o}$ que determina cuantas unidades de oxígeno necesita una unidad de biomasa para crecer y reproducirse.

$$\text{Consumo Biomasa} = \frac{\mu * x}{Y_{x/o}} \quad (108)$$

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de oxígeno.

ECUACIÓN:

$$\frac{dO}{dt} = \left(\frac{F * O_0}{V} \right) - \left(\frac{F * O}{V} \right) + oR - \frac{\mu * x}{Y_{x/o}} \quad (109)$$

si la oferta de oxígeno es menor que la capacidad de absorción del agua, se transfiere todo el oxígeno ofertado

$$\text{Oxígeno inyectado} = \text{Aire inyectado} * \left(\frac{\text{Boquillas operando}}{\text{Boquillas Totales}} \right) * 0,21 * 1,02$$

$$oR = \text{Oxígeno inyectado} * \text{eficiencia} / \text{volumen}$$

si la oferta de oxígeno supera la capacidad de absorción del agua, se transfiere solo lo que es posible

$$oR = \text{capacidad de absorción} = kLa*(C-O)$$

C = concentración de saturación de oxígeno disuelto en el agua

$$kLa = 0,0046*\text{Oxígeno inyectado}$$

5.7. BALANCE DE HIDROGENIONES

La concentración de hidrogeniones en el agua a tratar es el único elemento que determina el pH, y esta influenciado directamente por las especies aportantes: especies ácidas como el sulfuro, fenol, carbonato; y especies básicas como el amonio. Cada especie, basándose en su constante de disociación, aporta una cantidad de iones hidrogenión (H_3O^+), o de iones hidroxilo (OH^-). Es el balance de cargas de estos iones lo que determina el pH del agua a tratar.

$$\frac{dH_3}{dt} = \text{Concentración en el afluente} - \text{Pérdida en el efluente} + \text{Producción Biomasa} \quad (110)$$

La concentración de hidrogeniones en el afluente está determinada por la concentración en el mismo de las diferentes especies aportantes. Es la disociación de estos los que generan los iones hidrogenión o hidroxilo quienes son los directos responsables del pH del agua. Este se calcula a un balance de energía a partir de las disociaciones de las especies aportantes.

$$\text{resultante} = \sqrt{\frac{K_{NH_3} * N_0}{PM_{NH_3}}} - \sqrt{\frac{2 * K_{CO_3} * CO_3_0}{PM_{CO_3}}} - \sqrt{\frac{2 * K_{H_2S} * H_0}{PM_{H_2S}}} - \sqrt{\frac{K_{Fenol} * S_0}{PM_{Fenol}}}$$

si $\text{resultante} < 0$, la concentración de iones OH^- es mayor
 $H_3_0 = -\text{resultante}$

si $\text{resultante} > 0$, la concentración de iones H_3O^+ es mayor
 $H_3_0 = 10^{-14} / \text{resultante}$

si $\text{resultante} = 0$, las concentraciones de iones son iguales
 $H_3_0 = 10^{-7}$, $pH = 7$

(111)

De igual manera que con todas las especies, se pierden iones en el efluente.

$$\text{Pérdida en el efluente} = \frac{F * H_3}{V} \quad (112)$$

La biomasa produce iones hidrogenión como resultado de la biodegradación de fenol. La cantidad de iones que una unidad de biomasa produce al biodegradar una unidad de fenol está determinada por el rendimiento Y_{x/H_3} .

$$\text{Producción por la biomasa} = \frac{\mu * x}{Y_{x/H_3}} \quad (113)$$

Reemplazando cada uno de los términos obtenemos la ecuación para el balance de hidrogeniones.

ECUACIÓN:
$$\frac{dH3}{dt} = \left(\frac{F * H3_0}{V} \right) - \left(\frac{F * H3}{V} \right) + \frac{\mu * x}{Y_{x/H3}} \quad (114)$$

5.8. ANALISIS DE SENSIBILIDAD

Con el fin de probar la fiabilidad y robustez del modelo matemático final, se desarrollaron una serie de pruebas de sensibilidad sobre los parámetros cinéticos que se sospechaban tienen mayor efecto sobre la cinética del proceso, tiempo de estabilización del sistema, y los niveles de las variables evaluadas luego de alcanzar la estabilidad. Con todo esto se esperaba hallar los límites numéricos del modelo, así como lograr una mejor aproximación al fenómeno real.

5.8.1. Estabilidad Numérica

Para probar la estabilidad numérica se probó el modelo matemático utilizando valores extremos para cada una de las concentraciones evaluadas, buscando que el sistema arrojará valores numéricos no aceptables.

Debido a que el modelo matemático es un sistema de ecuaciones diferenciales lineales ordinarias simultáneas con una ecuación algebraica (ecuación de velocidad de crecimiento), es esta última ecuación la que brinda la estabilidad y robustez para que el sistema nunca arroje valores erróneos. Esto se da a que la velocidad de crecimiento nunca llega a ser menor que cero, por tanto las concentraciones de las variables estudiadas tampoco serán negativas.

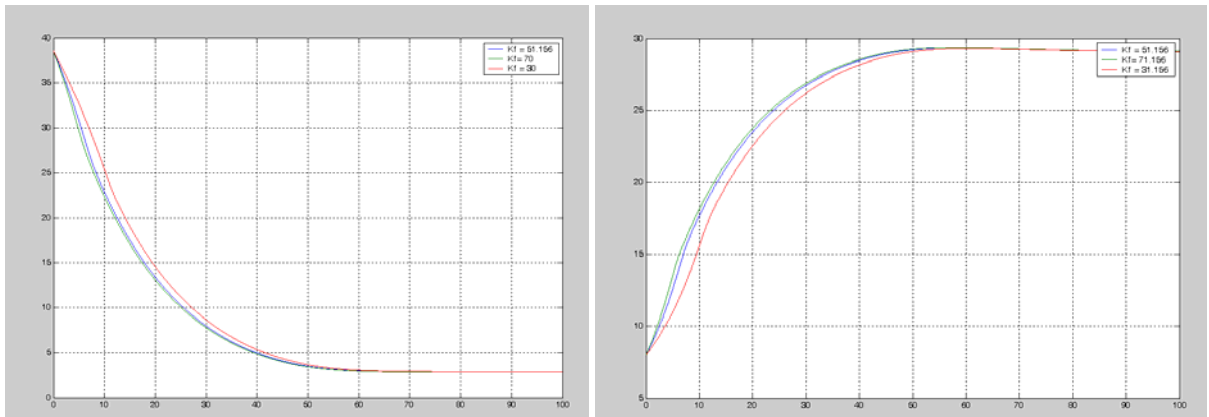
Existen, sí, algunas limitaciones numéricas como lo es la ecuación de balance de sulfuro la cual, debido a la naturaleza exponencial de la constante de despojamiento, para su solución esta ecuación necesita de un paso mucho más fino.

La segunda limitación numérica es la ecuación de balance de amonio, en el término de *Consumo de Biomasa*, dado que la ecuación de velocidad de crecimiento no reconoce cuándo los niveles de amonio son cero, o negativos, para así cesar la demanda de amonio. Para evitar esto, sencillamente se agrega un filtro que corrija las concentraciones negativas en esta variable

5.8.2. Constante de Inhibición del Fenol (Kf)

La constante de inhibición del fenol indica la concentración de fenol a la cuál la biomasa se inhibe, según el modelo de Haldane. La variación de esta variable no afecto en gran medida ni los niveles en la estabilización ni el tiempo necesario para que el sistema se estabilizara.

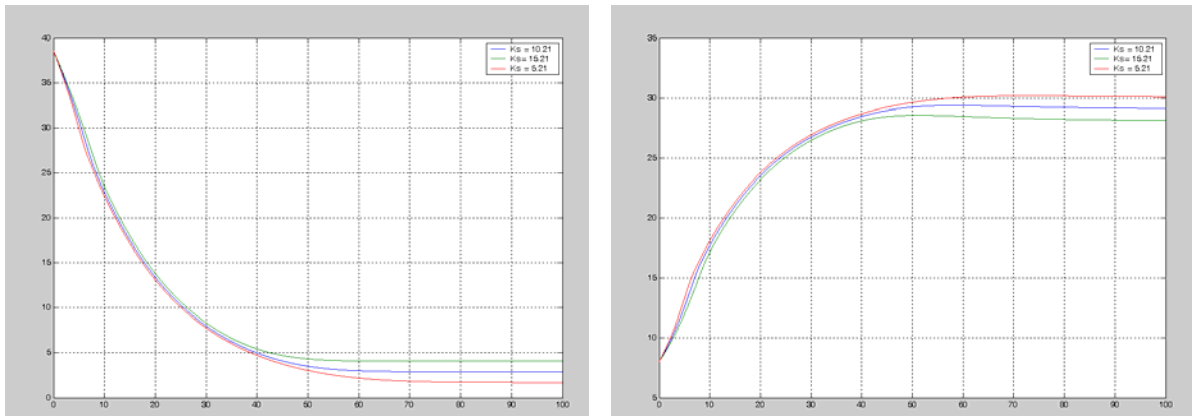
Figura 34. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar Kf



5.8.3. Constante de Saturación del Fenol (K_s)

A diferencia de la constante de inhibición de fenol, la constante de saturación (termino que se multiplica por la inhibición competitiva provocada por el sulfuro y el amonio) presenta un fuerte impacto tanto sobre el tiempo de estabilización, como sobre los niveles de estabilización, dado que este parámetro puede intensificar o amortiguar los efectos inhibitorios del sulfuro y del amonio.

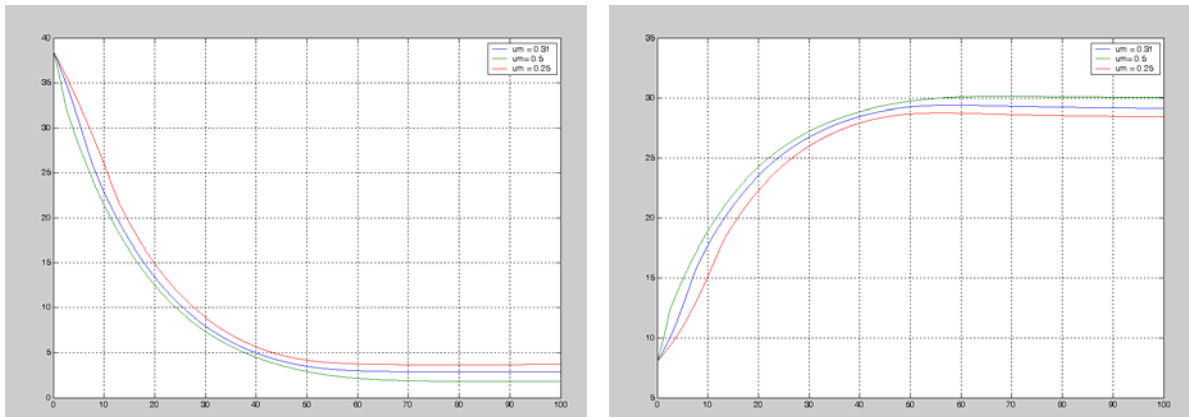
Figura 35. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar Ks



5.8.4. Velocidad Máxima de Crecimiento (μ_{max})

Como era de esperarse, la variación en la velocidad máxima de crecimiento afecta de manera visible, tanto en el tiempo de estabilización, como en los niveles de las variables.

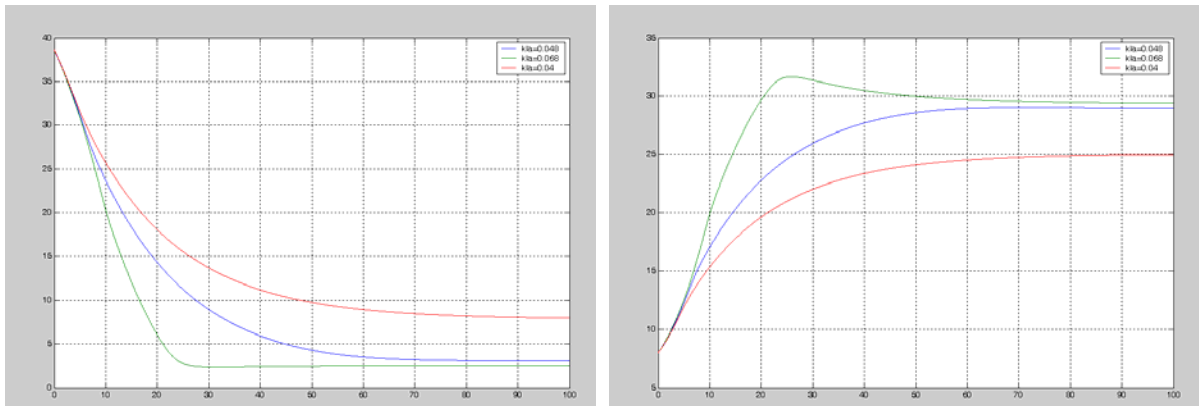
Figura 36. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar μ_m



5.8.5. Constante de Transferencia de Masa (kLa)

El modelo matemático toma la constante de transferencia de masa directamente proporcional, de manera lineal, a la cantidad de oxígeno inyectado por el sistema de aireación. Al aumentar esta pendiente, es lógico que aumente la cantidad de oxígeno que es disuelto en el agua de manera efectiva. Esto quiere decir, a una menor transferencia efectiva de oxígeno (poca turbulencia, alta turbiedad, baja velocidad, geometría del bio-reactor ineficiente, pobre distribución del sistema de boquillas en el fondo del bio-reactor), menor va a ser el rendimiento del sistema.

Figura 37. Niveles de fenol y biomasa respectivamente al variar kLa

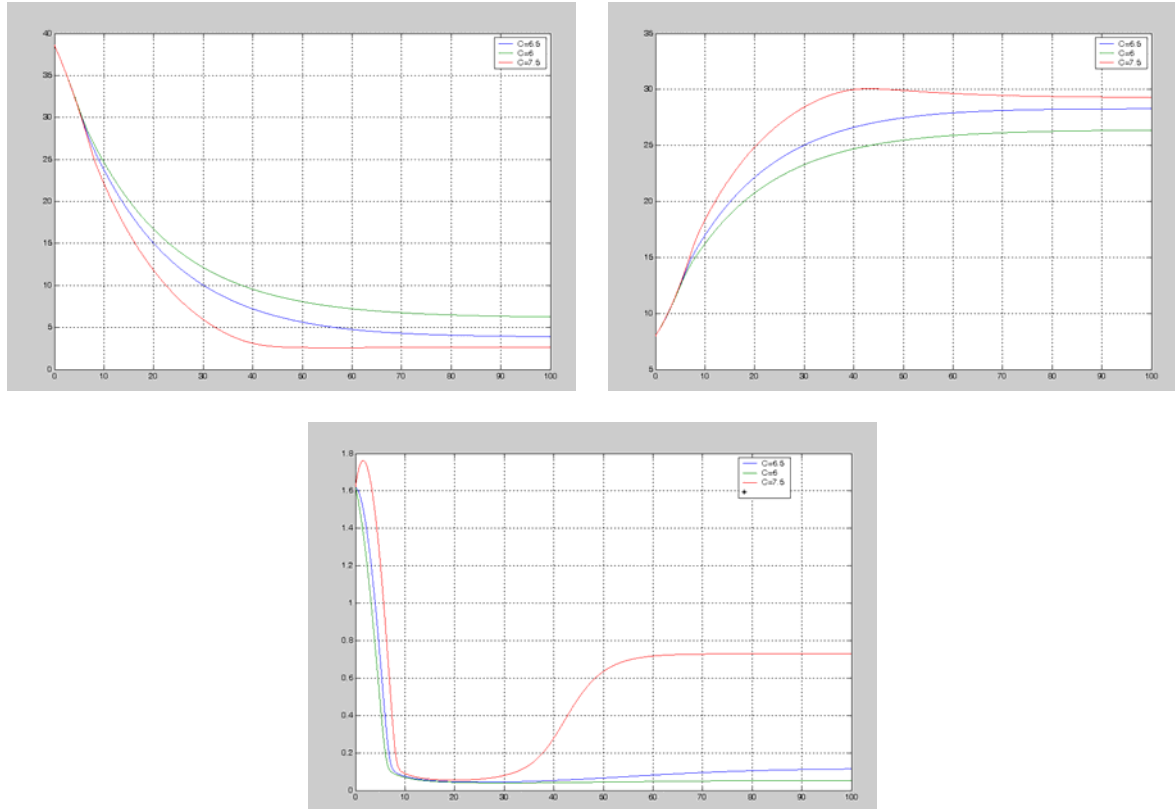


5.8.6. Concentración de Saturación de Oxígeno en el Agua (C)

La concentración de saturación de oxígeno en el agua determina la concentración máxima de oxígeno que el agua estudiada puede disolver en un momento determinado. Un leve aumento de este parámetro significa una mayor concentración de oxígeno en el agua, y por tanto un mayor porcentaje de remoción de fenol. Esto nos dice que el sistema real

tendría mejores resultados en condiciones atmosféricas que permitan una mejor disolución del oxígeno en el agua, es decir, a nivel del mar.

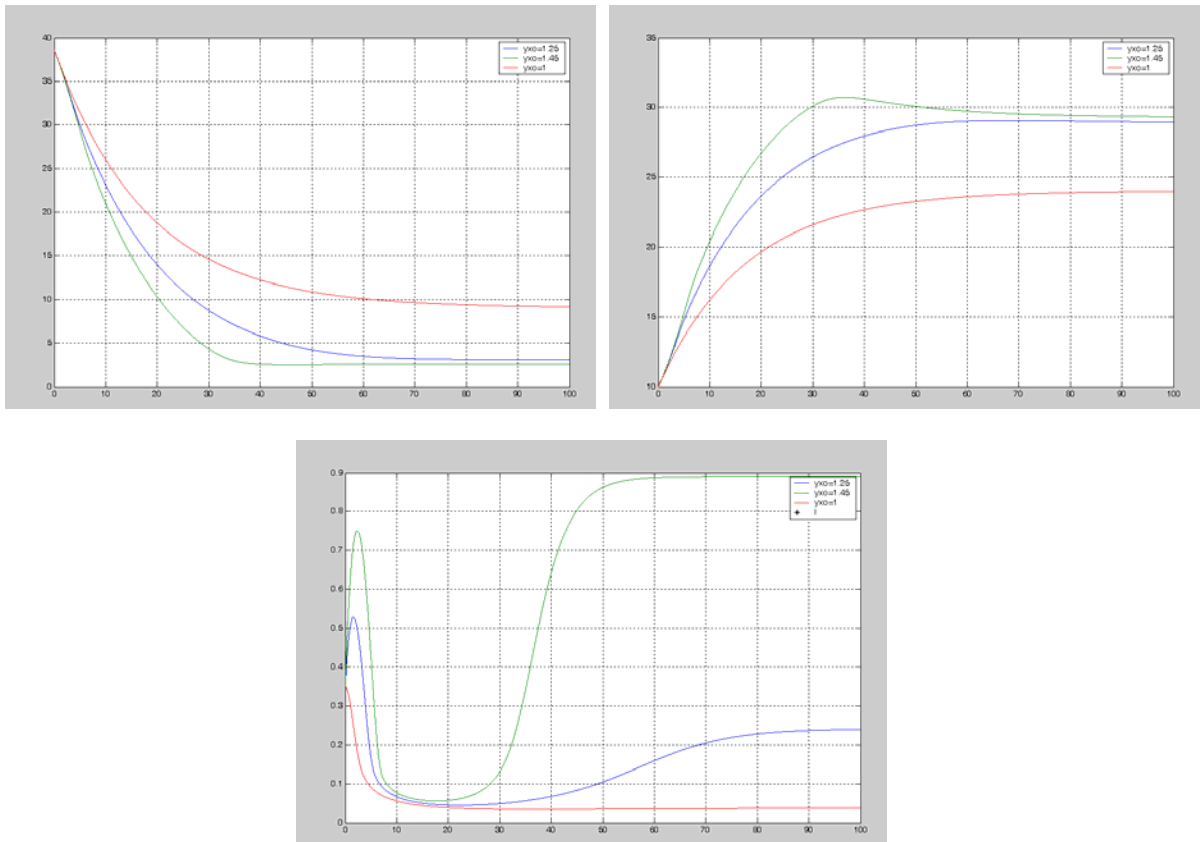
Figura 38. Niveles de fenol, biomasa y oxígeno respectivamente al variar C



5.8.7. Rendimiento de la Biomasa con Respecto al Oxígeno ($Y_{x/O}$)

El rendimiento de la biomasa con respecto al oxígeno determina las unidades (mg/l) de oxígeno necesarias para que una unidad de biomasa biodegrade una unidad de fenol. Un mayor rendimiento significa que la biomasa consume menos oxígeno para lograr esta tarea. Esto quiere decir que, si se desarrollara un *pool* de bacterias más eficientes en la demanda de oxígeno, el sistema real mejoraría notablemente los porcentajes de remoción de fenol.

Figura 39. Niveles de fenol, biomasa y oxígeno respectivamente al variar $Y_{x/O}$



5.9. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

- El modelo matemático que se obtuvo al final de todo este desarrollo ha mostrado describir con un alto porcentaje de fiabilidad los complicados fenómenos que ocurren al interior del bio-reactor de la refinería GCB. La mayoría de estos fenómenos ocurren de manera simultánea, y la realización de muestreos para lograr identificarlos son costosos, lentos, y no siempre permiten ver la totalidad del problema.
- El modelo matemático nos ha permitido jugar con cada uno de estos fenómenos de manera independiente, y sus resultados han sido comparados con datos experimentales y tomados de la literatura de manera satisfactoria, ofreciendo una mejor comprensión del sistema real.
- Como conclusiones del análisis del modelo matemático podemos plantear que:
- Los tiempos de residencia dentro del bio-reactor juegan un papel importante en los niveles de fenol al momento de estabilizarse el sistema. Un aumento de solo la mitad del tiempo de residencia produce casi el doble del porcentaje de remoción de fenol. Una forma de aumentar el tiempo de residencia es disminuyendo el flujo del afluente. Dado que este valor está determinado por el flujo de los diferentes efluentes de

procesos de la refinería, otra opción es aumentar el volumen del bio-reactor, pero debido a los costos que esto implica, esta medida no es viable.

- También es de vital importancia el oxígeno inyectado al sistema, pues sin este es imposible que haya biodegradación. Es por tanto necesario que se incluyan sistemas de aireación en la segunda etapa del proceso, sino en la tercera etapa también. Esto aumentaría el tiempo eficaz en el que la biomasa tiene oportunidad para biodegradar el fenol.
- Cuando se realizaron pruebas con variaciones en las concentraciones de los diferentes elementos en el afluente, se notó que aunque el sistema es capaz de soportar dichas variaciones, estas impiden que el sistema se estabilice, y ciertos picos de concentraciones de algunos compuestos (sulfuro, pH a la entrada) pueden inhibir parcial o totalmente la biomasa, incluso provocar su muerte. Es por esto que el control de las concentraciones de estos compuestos aguas arriba es tan necesario.
- Aunque se asumió que el 100% del sistema de aireación funcionó durante las simulaciones, también se hicieron pruebas con un 80%, 60%, e incluso solo un 50% del sistema de aireación en funcionamiento, con tal de simular el desgaste visto en el sistema real. Como era de esperarse, el modelo simuló pésimos niveles de remoción de fenol, pero debido a la dificultad y costo de mantener un sistema de aireación funcionando a su total capacidad es difícil proponer soluciones al respecto.
- También se observó que el diseño el bio-reactor no favorece la disolución del oxígeno en el agua, y este se ve reflejado en un valor muy bajo del coeficiente de transferencia de masa. Una solución sería añadir soluciones (i.e.: agitadores, diseño *many-flow* a la entrada) que mejoren esta transferencia.

Como es necesario en todo trabajo académico, se toman las siguientes recomendaciones para un posterior desarrollo y mejoramiento de este modelo:

- Una mejor aproximación al modelo de determinación de pH en función de las concentraciones de especies disueltas en el agua.
- Una mejor descripción del coeficiente de transferencia de masa, no solo en función del oxígeno inyectado.
- Se recomendaría tomar en cuenta la descripción hidrodinámica del bio-reactor, ya que este presente “zonas muertas” donde es posible que no haya ningún tipo de biodegradación.

6. APLICACIÓN SOFTWARE

Una vez se contó con el objetivo principal del proyecto que es el modelo matemático, el siguiente paso a seguir era la construcción de una interface amigable, funcional y práctica, la cuál sirviera para contener el modelo matemático en función de su uso y manipulación por parte del personal del ICP-ECOPETROL y la administración de la PTAR GCB.

En relación con la interface deseada por el personal de ECOPETROL, esta debía cumplir con la siguiente lista de requisitos:

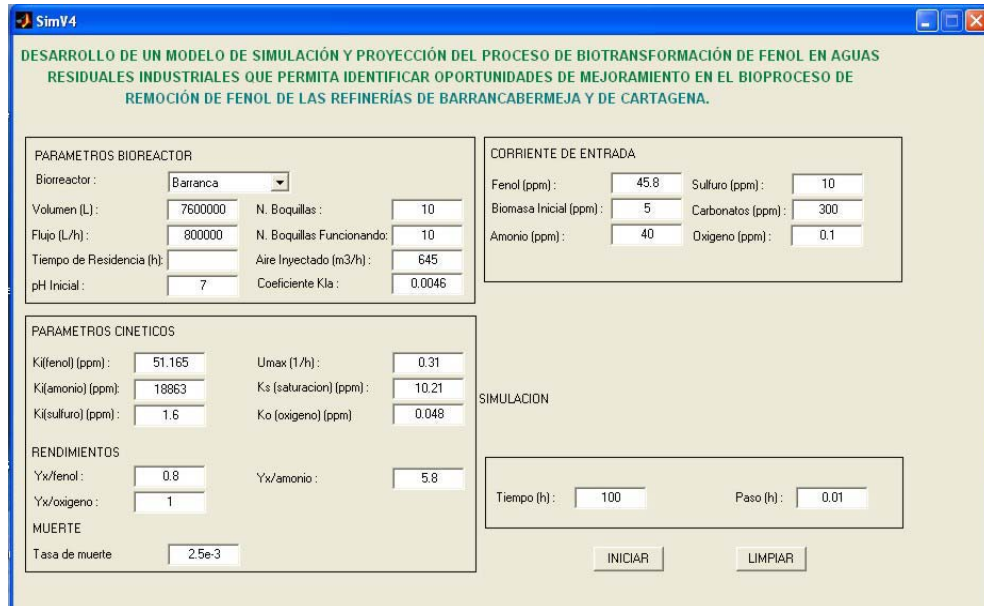
- La plataforma utilizada debía ser Microsoft Windows, teniendo en cuenta que es el sistema operativo con el que cuentan la mayoría del personal de ECOPETROL.
- La aplicación debía poder ser ejecutada en cualquier máquina Windows con el mínimo de requisitos de instalación.
- Dado que este proyecto de grado se encuentra soportado en la primera de dos (2) etapas previstas, el lenguaje de programación escogido debía permitir la expansión de la aplicación. Además, el código desarrollado debía ser modular y transportable.
- Compatibilidad con la herramienta Microsoft Office Excel, la cuál es ampliamente utilizada por el personal de ECOPETROL.
- Facilidad para la introducción de los valores de las variables cinéticas, configuraciones de diseño y condiciones de funcionamiento.
- Medio gráfico y tabulado para la presentación de los resultados de la simulación. Y por último,
- Capacidad de introducir alteraciones en el funcionamiento de la simulación para así poder recrear condiciones y escenarios reales de funcionamiento.

6.1. PRIMERA APROXIMACIÓN DE LA INTERFACE

Durante el desarrollo del proyecto se realizaron varias reuniones de avance con el personal del ICP-ECOPETROL vinculado al proyecto, donde era necesario contar con una interface acorde al nivel de desarrollo del mismo para la presentación de resultados y avances.

Dada la complejidad de exportar el sistema de ecuaciones desde un archivo *.m* ejecutable en MATLAB a una interface desarrollada en un lenguaje de programación de propósito general, se optó por diseñar una interface ligera utilizando los componentes GUIDE del mismo MATLAB. Estas primeras interfaces eran temporales y limitaban la información que se mostraba y se tomaba del usuario. Aunque su usabilidad era igual de limitada, servían al propósito de mostrar avances en el desarrollo de la estructura del modelo matemático, de manera temporal, sin necesidad de exportar el modelo matemático a un ambiente diferente.

Figura 40. Primera aproximación de la interface en MatLAB



6.2. INTERFACE FINAL

Como solución a los requerimientos planteados por el personal del ICP-ECOPETROL, la solución software desarrollada presenta las siguientes características:

- Interface inteligente e intuitiva, dividida en ventanas, la cual intenta adelantarse a los errores del usuario.
- Uso de archivos de texto planos como importadores/exportadores de los parámetros de la solución numérica, para facilitar la corrección de errores por fuera de la interface.
- Presentación de la herramienta según los sistemas de bio-degradación para los cuales fue diseñada (GCB, GRC, Piloto), cada uno caracterizado plenamente.
- Presentación en diferentes ventanas de aplicación para cada nuevo sistema creado.
- Presentación de diferentes escenarios simultáneos en ventanas independientes para un mismo sistema.
- Casi todos los parámetros numéricos involucrados en la simulación son modificables.
- Presentación de los parámetros de diseño, funcionamiento y del proceso en ventanas separadas.
- Independencia de los parámetros de diseño, funcionamiento y del proceso para cada sistema y para cada escenario.
- Varios modos de simulación numérica.

- Presentación de resultados de manera gráfica y tabulada, en ventanas independientes de los planteamientos de la simulación.
- Exportabilidad de los resultados.

6.2.1. Lenguaje de Programación Escogido

Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias simultáneas con una ecuación algebraica requiere de un lenguaje de programación con un alto desempeño numérico. En esta definición cabe a la perfección la herramienta MATLAB, siendo por esto la herramienta utilizada durante la etapa de desarrollo y validación de los modelos matemáticos prototipos. Es de notar que MATLAB presenta serias limitaciones al momento de diseñar interfaces amigables y prácticas, por lo cuál su uso en el desarrollo de la aplicación final fue descartado.

Para esta etapa se escogió Microsoft Visual C# .NET 2003, debido a su gran capacidad de calculo numérico, aunque es inferior si se le compara con Microsoft Visual C++ .NET 2003; C# es lo suficientemente flexible y fácil de programar como para soportar las posteriores expansiones y modificaciones en la interface y código de simulación previstas para los siguientes dos años de desarrollo del proyecto.

6.2.2. Graficas y Presentación de Resultados

Para la presentación gráfica de resultados se escogió la herramienta Steema TeeChart.Lite v2 compatible con C# .NET. TeeChart se comporta como un *plug-in* para Microsoft Visual Studio .NET, y se compila como librerías *.dll* junto con el archivo ejecutable resultante. Estas librerías que se generan son de tamaño liviano y el único requisito para el correcto funcionamiento de TeeChart es que éstas se encuentren en la misma carpeta raíz del archivo ejecutable.

Visualmente, TeeChart es una herramienta atractiva, con diferentes modos de presentación de series de datos, amable con el usuario, y ligera. Desde el punto de vista de programación es una herramienta intuitiva, fácil de utilizar y modificable tanto en tiempo de compilación como de ejecución.

De igual forman, se utiliza la versión *Lite*, la cuál, aunque es gratuita, cuenta con todas las opciones necesarias para presentar las simulaciones calculadas de manera elegante, sencilla y completa.

6.2.3. Variables de Diseño y Modelo Cinético

Para darle flexibilidad a la aplicación, los parámetros necesarios para la simulación, como las configuraciones y diseños de cada etapa del bio-reactor, además de los parámetros del modelo cinético, pueden ser cargados desde archivos de texto con un formato previamente validado. Esto da una independencia del código compilado al

poder hacer correcciones a los valores de los parámetros sin necesidad de modificar el código fuente.

6.2.4. Escenarios Reales

Es posible importar desde archivos de texto y/o crear desde la aplicación, tablas de valores de concentraciones en el afluente y efluente, variantes o no en el tiempo, que representen condiciones y escenarios vistos en planta. Estas alteraciones sirven como punto de partida para la validación del modelo así como para la subsecuente predicción de problemas y toma de decisiones.

Estas perturbaciones, aunque puntuales, también pueden ser realizadas en tiempo real modificando cualquier valor de las variables a tratar durante la ejecución de la simulación.

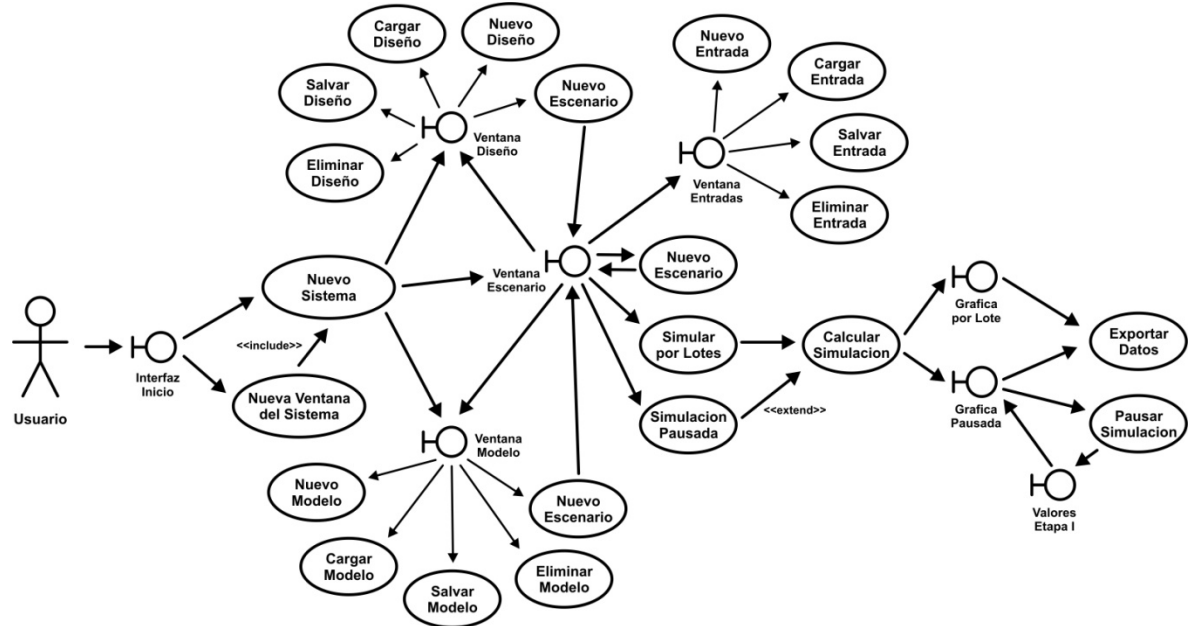
6.2.5. Compatibilidad Con Microsoft Excel

Los resultados de la simulación obtenidos pueden ser exportados a un archivo de texto tabulado compatible con Microsoft Office Excel para un análisis mas detallado, o bien para comodidad del usuario.

Dado el volumen de información que arrojan las simulaciones, el manejo de archivos de texto planos tabulados permite el ahorro de espacio y tamaño de archivo al transportar estos resultados de un computador a otro, así como su lectura utilizando cualquier tipo de editor de texto, independiente de la plataforma utilizada (Microsoft Windows o Linux).

6.3. DIAGRAMA DE CASOS DE USO

Figura 41. Diagrama de casos de uso



6.4. VENTANAS DE LA APLICACION

A continuación se presenta una breve descripción de las ventanas de la aplicación y su respectivo comportamiento. Para más información por favor dirijase a la ayuda contenida en la aplicación, utilizando para esto la tecla **F1**.

6.4.1. Ventana de Inicio

Esta es la primera ventana se le presenta al usuario. Desde aquí se puede escoger un nuevo sistema a estudiar, sea un sistema como el localizado en la ciudad de Barranca (PTAR GCB) un sistema como el localizado en la ciudad de Cartagena (Skim Pond GRC) o un sistema de planta piloto (GCB U-4081C)

El usuario puede escoger abrir por defecto la ventana del escenario a simular, o escoger cualquiera de las tres ventanas principales.

Figura 42. Ventana de inicio



6.4.2. Ventana de Escenario

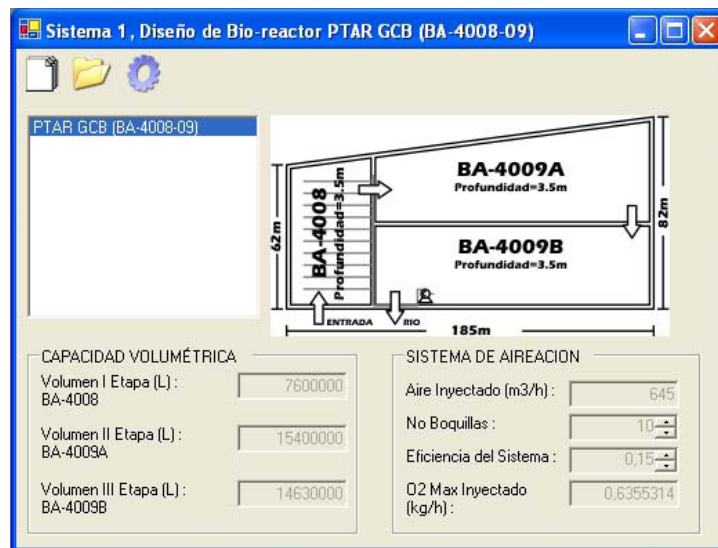
Figura 43. Ventana de escenario de simulación

Esta es la ventana principal con lo que respecta al inicio de corridas de simulación. Desde esta ventana se puede:

- Escoger el modelo cinético y la configuración de bio-reactor para correr la simulación.
- Determinar las concentraciones de los elementos en el afluente, ya sean constantes o seleccionar el vector de entrada para concentraciones variantes en el tiempo.
- Establecer los parámetros de funcionamiento del bio-reactor y condiciones iniciales para la simulación.
- Establecer el tiempo de simulación, el paso de simulación, y el tipo de cálculo de la simulación, ya sea por lotes o habilitando pausas determinados por el usuario.

6.4.3. Ventana de Diseño de Bio-reactor

Figura 44. Ventana de diseño de bio-reactor

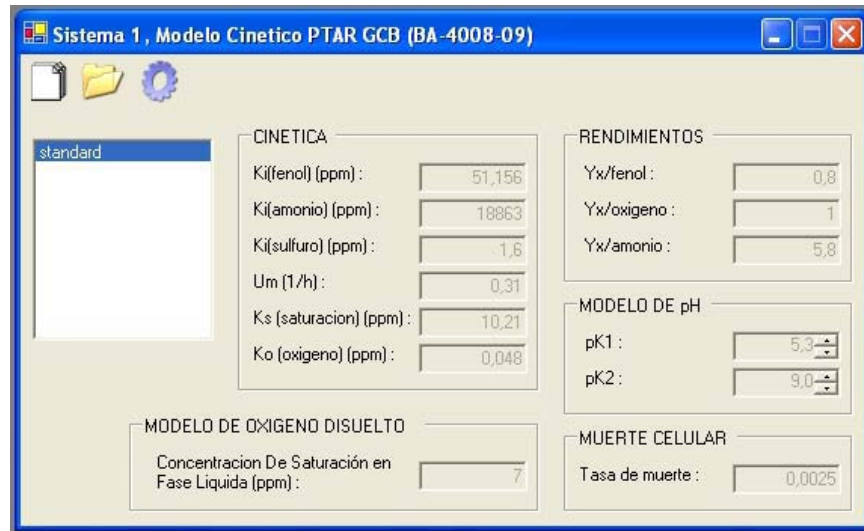


Muestra las características de diseño del bio-reactor del sistema escogido. En esta ventana se puede:

- Crear nuevas configuraciones de diseño del bio-reactor.
- Hacer modificaciones a la configuración seleccionada.
- Salvar estos cambios en un archivo de texto plano debidamente formateado, y posteriormente cargar estas configuraciones desde disco.

6.4.4. Ventana de Modelo Cinético

Figura 4. Ventana de modelo cinético



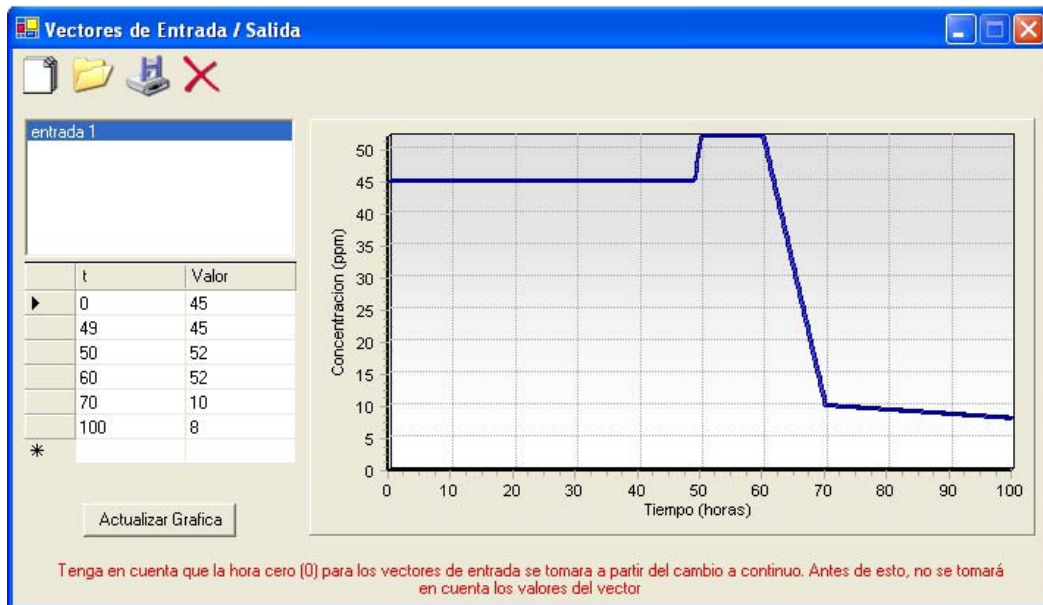
Muestra los parámetros que componen el modelo cinético que rige la simulación. En esta ventana se puede:

- Crear nuevos modelos cinéticos.
- Hacer modificaciones al modelo cinético seleccionado.
- Salvar estos cambios en un archivo de texto plano debidamente formateado, y posteriormente cargar estas configuraciones desde disco.

Se recomienda no alterar no utilizar modelos cinéticos alterados, dado que éste está calibrado especialmente para el sistema.

6.4.5. Ventana de Valores de Entrada/Salida

Figura 46. Ventana de valores de entrada/salida



Esta ventana cumple la función de ingresar nuevos vectores de valores de entrada para ser utilizados como perturbaciones en el afluente, o bien sea como grupos de datos experimentales para ser comparados con los resultados de la simulación. Estos vectores también se pueden cargar desde archivos correctamente formateados.

6.4.6. Ventana de Graficos de Simulación por Lote

Esta es la principal ventana utilizada para mostrar los resultados en pantalla. Existe una de estas ventanas por cada etapa simulada. Cuenta con dos gráficas: una para los perfiles de biomasa, fenol, amonio y sulfuro, y una segunda con los perfiles de oxígeno y pH. Presenta además los valores de cada variable tabulados en el tiempo y un resumen de las condiciones de simulación.

Figura 47. Perfiles de fenol y biomasa en una simulación por lotes

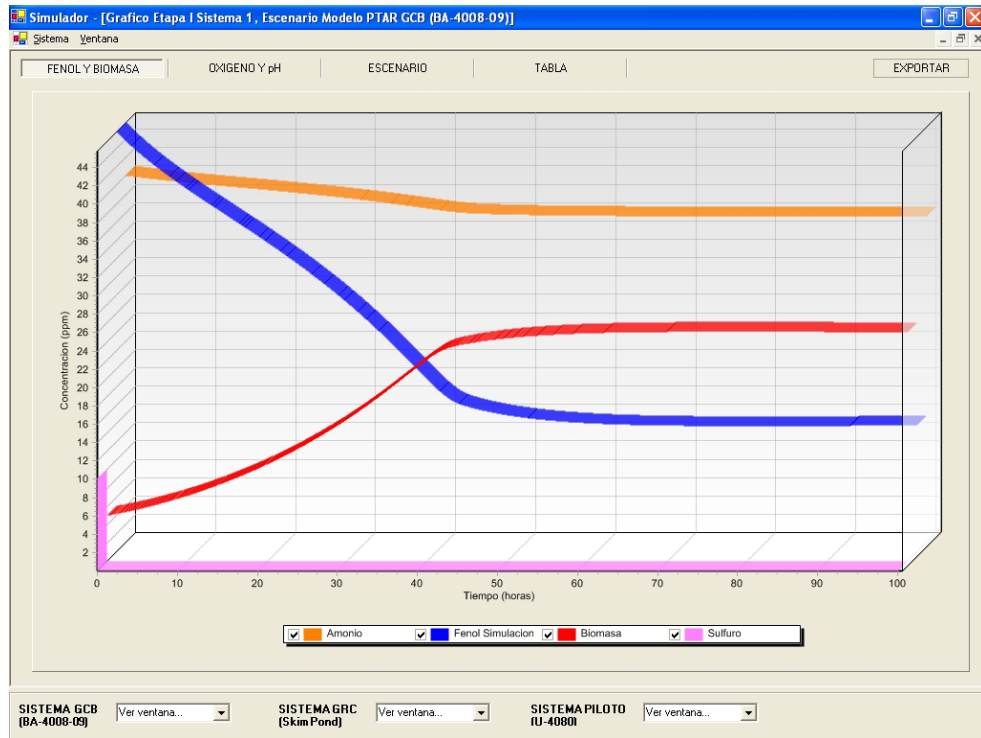


Figura 48. Perfiles de oxígeno y pH en una simulación por lotes

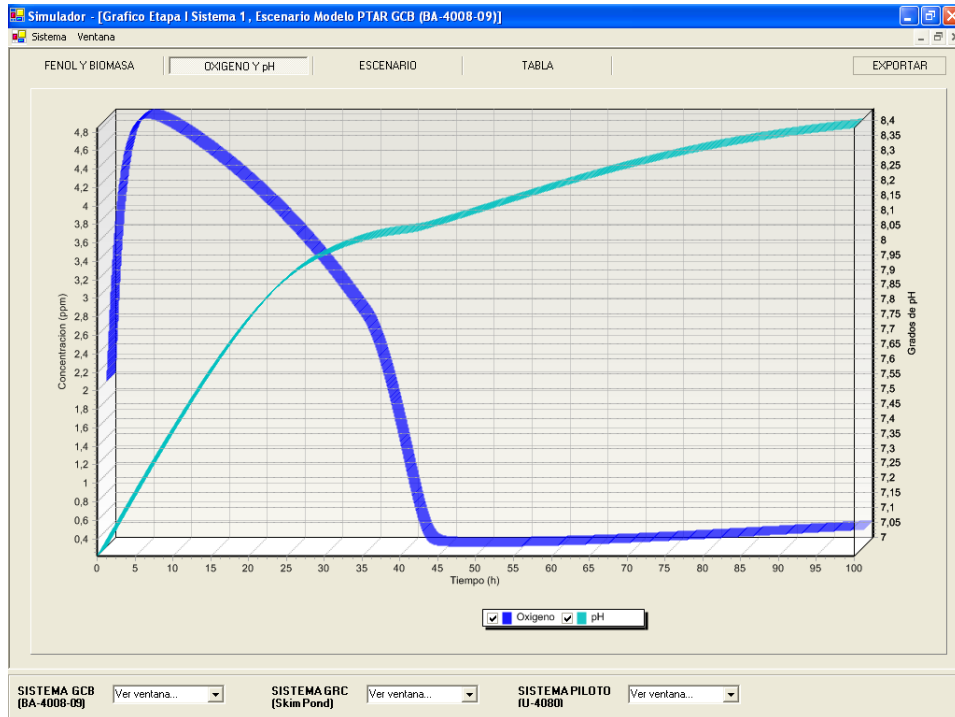


Figura 49. Tabla de datos en una simulación por lotes

t	Biomasa	Fenol	Amonio	Sulfuro	Oxigeno	pH
45,19	23,7869059	15,54611767	35,82705071	0,009673727	0,218075708	8,113351671
45,2	23,78849050	15,54399701	35,82675820	0,009673727	0,218046161	8,113429348
45,21	23,79002862	15,54187875	35,82646603	0,009673727	0,218016777	8,113507036
45,22	23,79156496	15,53976288	35,82617419	0,009673727	0,217987554	8,113584735
45,23	23,79309950	15,53764939	35,82588267	0,009673727	0,217958489	8,113662445
45,24	23,79463227	15,53553830	35,82559148	0,009673727	0,217929583	8,113740166
45,25	23,79616326	15,53342958	35,82530063	0,009673727	0,217900832	8,113817899
45,26	23,79769248	15,53132323	35,82501010	0,009673727	0,217872235	8,113895643
45,27	23,79921993	15,52921926	35,82471989	0,009673727	0,217843790	8,113973397
45,28	23,80074561	15,52711785	35,82443002	0,009673727	0,217815497	8,114051163
45,29	23,80226953	15,52501840	35,82414046	0,009673727	0,217787353	8,114128940
45,3	23,80379168	15,52292151	35,82385124	0,009673727	0,217759356	8,114206727
45,31	23,80531208	15,52082697	35,82356234	0,009673727	0,217731506	8,114284526
45,32	23,80683073	15,51873478	35,82327376	0,009673727	0,217703801	8,114362336
45,33	23,80834762	15,51664494	35,82298551	0,009673727	0,217676240	8,114440156
45,34	23,80986277	15,51455744	35,82269757	0,009673727	0,217648820	8,114517987
45,35	23,81137617	15,51247228	35,82240997	0,009673727	0,217621541	8,114595829
45,36	23,81288783	15,51038945	35,82212268	0,009673727	0,217594402	8,114673682
45,37	23,81439775	15,50830895	35,82183571	0,009673727	0,217567400	8,114751545
45,38	23,81590594	15,50623077	35,82154907	0,009673727	0,217540635	8,114829419
45,39	23,81741239	15,50415492	35,82126274	0,009673727	0,217513806	8,114907304
45,4	23,81891711	15,50208138	35,82097674	0,009673727	0,217487211	8,114985200
45,41	23,82042011	15,50001016	35,82069105	0,009673727	0,217460749	8,115063106
45,42	23,82192139	15,49794124	35,82040568	0,009673727	0,217434418	8,115141022
45,43	23,82342094	15,49587464	35,82012064	0,009673727	0,217408219	8,115218950
45,44	23,82491877	15,49381033	35,81983590	0,009673727	0,217382148	8,115296887
45,45	23,82641490	15,49174833	35,81955149	0,009673727	0,217356206	8,115374836
45,46	23,82790930	15,48968862	35,81926739	0,009673727	0,217330391	8,115452794
45,47	23,82940200	15,48763120	35,81898361	0,009673727	0,217304703	8,115530763
45,48	23,83089300	15,48557607	35,81870014	0,009673727	0,217279139	8,115608743
45,49	23,83238228	15,48352323	35,81841699	0,009673727	0,217253700	8,115686733
45,5	23,83386987	15,48147266	35,81813416	0,009673727	0,217228383	8,115764733
45,51	23,83535976	15,47942438	35,81785163	0,009673727	0,217203188	8,115842744

Figura 50. Resumen del escenario en una simulación por lotes

SISTEMA 1, ESCENARIO MODELO PTAR GCB (BA-4008-09)

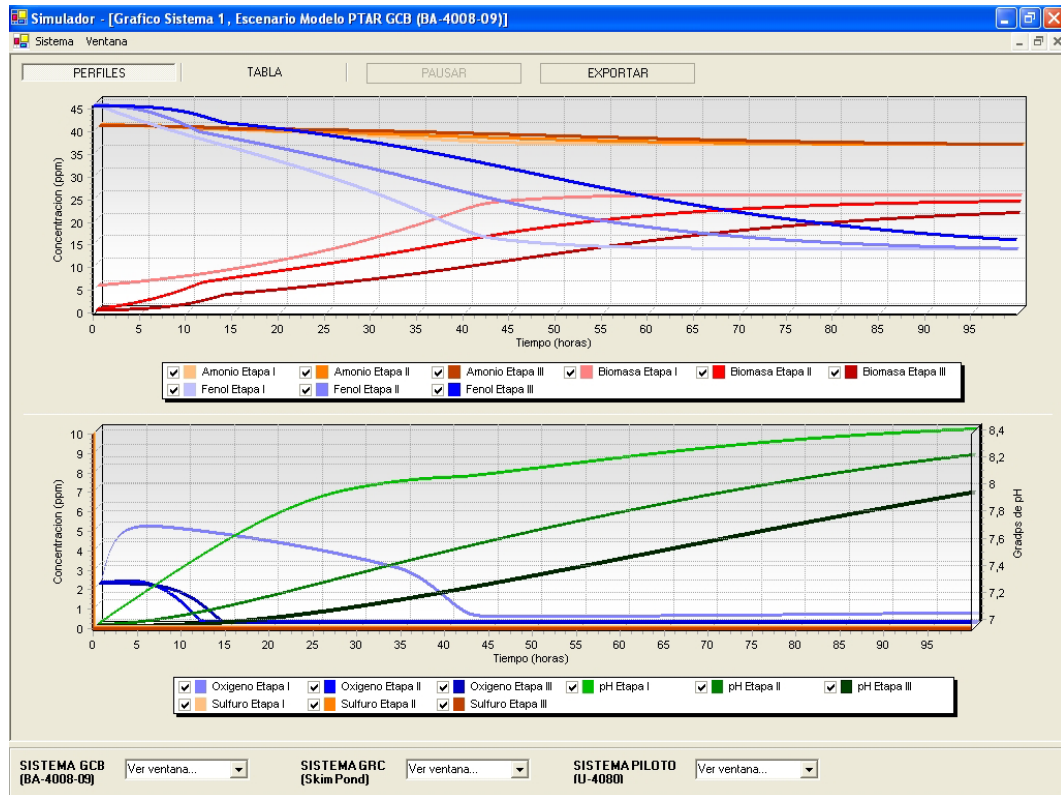
DISEÑO DEL BIO-REACTOR		MODELO CINETICO	
Tipo:	GCB	K(fenol) (ppm):	51,156
Etapas:	3	K(amoniaco) (ppm):	18863
Etapas I:	BA-4008	K(sulfuro) (ppm):	1,6
Etapas II:	BA-4009A	Um (l/h):	0,31
Etapas III:	BA-4009B	Ks (saturación) (ppm):	10,21
Volumen I:	7600000 L	Ko (oxigeno) (ppm):	0,048
Volumen II:	15400000 L	Yx/fenol:	0,8
Volumen III:	14630000 L	Yx/oxigeno:	1
Flujo:	300000 L/h	Yx/amoniaco:	5,8
Boquillas:	10	pK1:	5,3
Aire:	645 m3/h	pK2:	9
Eficiencia:	0,15	Concentración Límite en el Agua (ppm):	7
kLa:	0,0046	Tasa de muestre:	0,0025

CONDICIONES DE FUNCIONAMIENTO

Etapas Funcionando:	3
Boquillas Operando:	10
Oxigeno Afluente:	0,1
Carbono Afluente:	300
Tiempo:	100
Paso:	0,01

6.4.7. Ventana de Grafico de Simulación Pausada

Figura 51. Perfiles de las variables en una simulación pausada



Es la segunda ventana dedicada a la presentación de resultados. Contiene una gráfica que se va actualizando a medida que avanza la simulación, a una velocidad escogida por el usuario en la ventana de escenario, en la lista de *Modo de Simulación*.

Presenta la cualidad de poder pausar la simulación para poder introducir modificaciones de tipo puntual a cada una de las variables, únicamente en la primera etapa.

Solo existe una instancia de esta ventana por escenario dado que todas las etapas simuladas se presentan al mismo tiempo.

REFERENCIA BIBLIOGRÁFICA

1. Metcalf y Eddy. Tratamiento y depuración de las aguas residuales. Editorial labor S.A Primera edición. Mayo 1977. 391- 443.
2. Bailey James E. y Ollis David f. Biochemical Engineering fundamentals. 2ed. McGraw-Hill international editions. 1986.
3. Peavy Howard S.; Rowe Donald R. Y Tchobanoglous George. Environmental Engineering. McGraw-Hill international editions. 1985.
4. III Curso Latinoamericano de Biotecnología, VIII curso internacional de ingeniería bioquímica. Universidad Católica de Valparaíso. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Bioquímica. 7- 19 Agosto 1988.
5. Watson I. A., Oswald S., Banwart S.A., Crouch R. S y Thornton S. Modeling the dynamics of fermentation and respiratory processes in a groundwater plume of phenolic contaminants interpreted from laboratory-to field -scale. Environ. Sci. Technol. 2005, 39, 8829-8839.
6. Reardon K.F.; Mosteller D.C.; Bull Rogers J.; DuTeau N.M. y Kee-Hong Kim. Biodegradation kinetics of aromatic hydrocarbon mixtures by pure and mixed bacterial cultures. Environmental Health Perspectives. Vol 110-supplement 6. Diciembre 2002.
7. Folsom B.R., Chapman P.J. y Pritchard P.H. Phenol and trichloroethylene degradation by pseudomonas cepacia G4: kinetics and interactions between substrates. Applied and Environmental Microbiology. Mayo 1990. 1279-1285.
8. Ojumu, T.V, Bello, O.O, Sonibare, J.A. y Solomon, B.O. Evaluation of microbial systems for bioremediation of petroleum refinery effluents in Nigeria. African journal of Biotechnology Vol.4(1) Enero 2005. 31-35.
9. Alagappan G. y Cowan R.M. Effect of temperature and dissolved oxygen on the growth kinetics of pseudomonas putida F1 growing on benzene and toluene. Chemosphere 54. 2004. 1255-1265.
10. Schmidt S.K., Simkins S. y Alexander M. Models for the kinetics of biodegradation of organic compounds not supporting growth. Appl Microbiol Biotechnol. Vol 50, 1985.
11. Peyton B.M., Wilson T. y Yonge D.R. Kinetics of phenol biodegradation in high salt solutions. Water Research 36. 2002. 4811-4820.
12. Kumar A., Kumar Shashi y Kumar Surendra. Biodegradation kinetics of phenol and catechol using pseudomonas putida MTCC 1194. Biochemical Engineering Journal 22. 2005. 151-159.
13. Magbanua B.S., Hoover P.A., Campbell P.J. y Bowers A.R. The effect of cosubstrates on phenol degradation kinetics. Wat. Sci. Tech. Vol. 30 N°9 67-77, 1994.
14. Orupold K., Masirin A. y Tenno T. Estimation of biodegradation parameters of phenolic compounds on activated sludge by respirometry. Chemosphere 44. 2001. 1273-1280.

15. Onysko K.A, Budman H.M. y Campbell W.R. Effect of temperature on the inhibition kinetics of phenol biodegradation by *pseudomonas putida* Q5. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 70, N°3, November 5, 2000.
16. Shishido M. y Toda M. Apparent zero-order kinetics of phenol biodegradation by substrate-inhibited microbes at low substrate concentrations. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 50, N°3, 1196. 709-711.
17. Wang K.W., Baltzis B.C. y Lewandowski G.A. Kinetics of phenol biodegradation in the presence of glucose. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 51. 1996. 87-94.
18. Feitkenhauer H., Schnicke S., Muller R. y Markl H. Determination of the kinetic parameters of the phenol-degrading thermophile *Bacillus thermoleovorans* sp. A2 *Appl Microbiol Biotechnol.* 2001. 57:744-750.
19. Seker. S., Beyenal H., Salih B., Tanyolac A. Multi-substrate growth kinetics of *pseudomonas putida* for phenol removal. *Appl Microbiol Biotechnol.* 1997. 47:610-614.
20. Reardon K.F., Mosteller D.C., Bull Rogers J. Biodegradation kinetics of benzene, toluene and phenol as simple and mixed substrates for *pseudomonas putida* F1. *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 69, N°4, August 20, 2000.
21. Cruickshank S.M., Daugulis A.J y McLellan P.J. Modelling of a continuous two-phase partitioning bioreactor for the degradation of xenobiotics. *Process Biochemistry* 35. 2000. 1027-1035.
22. Ebenhoh W. Y Berthe-Corti L. Modelling of hexadecane degradation in continuous-flow cultures. *BioSystems* 59. 2001. 159-183.
23. Jungblut J., Sievers M., Vogelpohl A., Bracio B.R. y Moller D.P.F. Dynamic simulation of wastewater treatment: the process of nitrification. *Simulation Practice and Theory* 5, 1997.689-700.
24. Lapara Timothy y Alleman James. Thermophilic aerobic biological wastewater treatment. *Water research.* Vol 33. N 4.1999. 895-908. 25.
25. Kumaran P. y Paruchuri L. Kinetics of phenol biotransformation. *Water research* Vol 31. No 1, 1997 11-22.
26. Monteiro Alvaro A.M.G, Boaventura Rui A.R, Rodriguez Alirio E. Phenol biodegradation by *Pseudomonas putida* DSM 548in a batch reactor. *Biochemical Engineering Journal* 6, 2000 45-49.
27. Wang Si-Jing y Loh Kai-Chee. Modeling the role of metabolic intermediates in kinetics of phenol biodegradation. *Enzyme and microbial technology* 25, 1999. 177-184.
28. Vázquez-Rodríguez Gabriela, Youssef C.B y Weissman-Vilanova Julio. Two-step modeling of the biodegradation of phenol by an acclimated activated sludge. *Chemical Engineering Journal* 117, 2006 245-252.
29. Okpokwasli G.C y Nweke C.O. Microbial growth and substrate utilization kinetics. *African Journal of biotechnology* Vol.5(4). 2005. 305-317.
30. Kangtaek Lee, Jin-Won Park, Ik-Sung Ahn. Effect of additional carbon source on naphthalene biodegradation by *pseudomonas Putida* G7. *Journal of Hazardous materials* B105, 2003. 157-167.

31. L. Amor, C. Kennes, Veiga M.C. Kinetics of inhibition in the biodegradation of monoaromatic hydrocarbons in presence of heavy metals. *Bioresources technology* 78, 2001. 181-185.
32. Si-Jing Wang y Kai-Chee Loh. Modeling the role of metabolic intermediates in kinetics of phenol biodegradation. *Enzyme and microbial technology* 25, 1999. 177-184.
33. Alper Nuhoglu y beste Yalcin. Modelling of phenol removal in a batch reactor. *Process biochemistry* 40, 2005. 1233-1239. 34.
34. Tsuey-Ping Chung, Cheng-Ying Wu y Ruey-Shin Juang. Improved dynamic on cell growth with substrate inhibition using two-phase models. *Biochemical engineering Journal* 25, 2005. 209-217.
35. Modeling competitive inhibition effects during biodegradation of BTEX mixtures
36. Bracho M, Díaz Laugeny y Soto L.M. biodegradación de hidrocarburos aromáticos policíclicos y heterocíclicos por *Pseudomonas* spp. *Scientific journal from the experimental Faculty of Sciences at La Universidad de Zulia*. V. 12 No.4. Octubre-diciembre 2004.
37. Sridhar Viamajala, Peyton Brent M., Richards lee A. y Petersen James N. Solubilization, solution equilibria, and biodegradation of PEH's under thermophilic conditions. *Chemosphere* 66 (2007) 1094-1106.
38. Maroto Arroyo M.E y Rogel Quesada J.M. Aplicación de sistemas de bioremediación de suelos y aguas contaminadas por hidrocarburos. *GEOCISA*. Div. Protección ambiental de suelos.
39. Casas López, J.L.; Rodríguez Porcel, E.M.; Oller Alberola, I.; Ballesteros Martín, M.M.; Sánchez Pérez, J.A.; Fernández Sevilla, J.M. and Chisti, Y., 2006. Simultaneous Determination of Oxygen Consumption Rate and Volumetric Oxygen Transfer Coefficient in Pneumatically Agitated Bioreactors. *Ind. Eng. Chem. Res.* 45: 1167-1171.
40. Galaction A.I.; CascavaL, D.; Oniscu, C. and Turnea, M. Prediction of oxygen mass transfer coefficients in stirred bioreactors for bacteria, yeast and fungus broths. *Biochemical Bioengineering Journal* 20: 85-94.
41. Melo J.S.; Kholi, S.; Patwardhan, A.W. and D'souza, S.F., 2005. Effect of oxygen transfer limitations in phenol biodegradation. *Process Biochemistry* 40: 625-628.
42. Ozbek Belma and Gayik, Sevgi, 2001. The studies on the oxygen mass transfer coefficient in a bioreactor. *Process Biochemistry*. 36: 729-741. 43.
43. Gillot S., Capela- Marsal S., Roustan M. y Heduit A. Predicting oxygen transfer of fine bubble diffused aeration systems---model issued from dimensional analysis. *Water Research* 39 (2005) 1379-1387.
44. Transferencia de masa, momento y calor en fermentaciones. Profesor Fernando Acevedo Bonzo. Universidad católica de Valparaíso. Pág. 73-93 45.
45. Rosso L., Lobby J.R., Bajard S. y Flandrois J.P. Convenient model to describe the combined effects of temperature and pH on microbial growth. *Applied and Environmental Microbiology*, V.61 No 2. Feb. 1995. p. 610-616.

46. Díaz, M.P. and J.L. Grosso, Proceso para la biodegradación de fenoles. 1999, Producto Tecnológico-Ecopetrol: Colombia.
47. Díaz, M.P. and J.L. Grosso, Proceso para la biodegradación de fenoles. 1999, Producto Tecnológico-Ecopetrol: Colombia.
48. Díaz, M.P. and J.L. Grosso, Proceso para la biodegradación de fenoles. 1999, Producto Tecnológico-Ecopetrol: Colombia.
49. Díaz, M.P. and J.L. Grosso. Biodegradación de fenoles en aguas residuales de la industria petrolera. in V Congreso Colombiano del Petróleo. 1995. Santafe de Bogotá.
50. Díaz, M.P., et al. Biodegradación de fenoles. in Encuentro de especialistas en biotecnología aplicada a la industria del petróleo. 1995. Los Teques, Venezuela: Intevep.
51. Beardsley, M.L. and J.M. Coffey, Biological wastewater treatment optimization. Conditions for bacterial growth, control parameters, and bioaugmentation. (Technical paper No. 83-06): p. 1-8.
52. Harmankaya, M. and G. Gunduz, Catalytic oxidation of phenol in aqueous solution. Tr. J. of Engineering and Environmental Sciences, 1998. 22: p. 9-15.
53. Carus, C., Company., Industrial chemical processing-Synthesis, purification and wastewater treatment. 2005.
54. Bravo, J.J., et al., Catalizadores para la purificación de aguas industriales que contengan compuestos resistentes a la biodegradación, Centro de Investigaciones en Catálisis, Universidad Industrial de Santander.
55. Matthews, R.W., Photocatalytic oxidation of organic contaminants in water: An aid to environmental preservation. Pure & Appl. Chem., 1992. 64(9): p. 1285-1290.
56. Crook, E.H., R.P. McDonnell, and J.T. McNulty, Removal and recovery of phenols from industrial waste effluents with Amberlite XAD polymeric adsorbents. Ind. Eng. Chem. Res. Dev., 1975. 14(2): p. 113-118.
57. Grosso, J.L. and M.P. Díaz, Biodegradación de fenoles en aguas residuales de la industria petrolera. Ciencia, Tecnología y Futuro, 1995. 1(1): p. 5-15.
58. Steven A. Siano. Use of the Abiotic Proton Balance for Describing the pHAuxostat. Biotechnology and Bioengineering, Vol. 64, N°6, September 20, 1999.
59. Kalyuzhnyi S.V. Batch anaerobic digestion of glucose and its mathematical modeling. II. Description, verification and application of model. Bioresource technology 59 (1997) 249-258.
60. Romero Rojas Jairo Alberto. Tratamiento de aguas residuales. Teoría y principios de diseño. Editorial Escuela Colombiana de Ingeniería. 2001.
61. U. Pawlowsky. J.A. Howell. Mixed culture biooxidation of phenol. I. Determination of kinetics parameters. Biotechnol. Bioeng. 15 (1973) 889-896.
62. A.G Livingston, H.A. Chase. Modeling phenol biodegradation in a fluidized-bed bioreactor. AIChE J. 35 (1989) 1980-1992.
63. R.W Szetela, T.Z. Winnicki. A novel method for determining the parameters of microbial kinetics. Biotechnol. Bioeng. 23 (1981) 1485-1490.

64. W.T Tang, L.S. Fan. Steady state phenol degradation in a draft-tube, gas-liquid-solid fluidized-bed bio-reactor. *AIChE J.* 33 (1987) 239-249.
65. R.D. Yang, A.E. Humphrey. Dynamic and steady state studies of phenol biodegradation in pure and mixed cultures. *Biotechnol. Bioeng.* 17 (1975) 1211-1235.
66. G.A Hill, C.W Robinson. Substrate inhibition kinetics: phenol degradation by *Pseudomonas putida*. *Biotechnol. Bioeng.* 17 (1975) 1599-1615.
67. SHARP J., JAGGER J. *Microsoft Visual C# .NET Paso a Paso*. Microsoft. 2003.
68. ICONTEC. Norma Técnica Colombiana. Documentación, presentación de Tesis, Trabajos de Grado y otros Trabajos de Investigación. 2002.

ANEXOS

ANEXO A: ARCHIVOS UTILIZADOS POR LA APLICACIÓN

La aplicación software desarrollada utiliza archivos de texto planos correctamente formateados para guardar los diferentes parámetros de los que se alimenta la simulación numérica.

Estos archivos son:

Archivos .PARAM

Contienen los parámetros que determinan el modelo cinético. Existe un archivo de estos por cada modelo cinético que se crea en la interface. Eliminar un modelo cinético de la interface no borra el archivo, sencillamente lo descarga de la memoria.

Restricción: Debe existir el archivo *default.param*, el cual contiene el modelo cinético por defecto. Sin este archivo, la aplicación no iniciará.

Archivos .CONF

Contienen los parámetros de diseño para cada uno de los tres sistemas disponibles en la interface. Existe un archivo de estos por cada diseño de bio-reactor que se crea en la interface. Eliminar un diseño de bio-reactor de la interface no borra el archivo, sencillamente lo descarga de la memoria.

Restricción: Deben existir los archivos *barrancaDefault.conf*, *cartagenaDefault.conf* y *pilotoDefault.conf*, que contiene los diseños por defecto para cada sistema. Sin estos archivos, la aplicación no iniciará.

Archivos .VAL

Contienen los valores de entrada/salida creados en la interface. Existe un archivo de estos por cada vector que se crea en la interface. Eliminar un vector de la interface no borra el archivo, sencillamente lo descarga de la memoria.

Estos archivos no presentan ninguna restricción.

Archivos .LCON

Contienen la última configuración con la que se inició una simulación, para cada sistema. Estos archivos no son modificables por el usuario desde la interface, y solo son utilizados

para cargar la última configuración de variables utilizadas cada vez que se crea un nuevo escenario para un sistema en específico. No presentan ninguna restricción.

Archivos .GRAPH

Contienen toda la información numérica resultado de una simulación correctamente formateada con tabuladores para lograr así una tabla compatible con Microsoft Excel, además de un resumen de cada uno de los valores, parámetros y configuraciones utilizadas para la simulación. No presentan ninguna restricción.

ANEXO B: REQUISITOS DEL SISTEMA

Para la correcta ejecución de la aplicación, se deben cumplir con los siguientes requisitos de sistema:

- Windows 2000 / ME / XP
- Microsoft Framework 1.2, o mejor, o compatibilidad para poder instalarse.
- Unidad CD-ROM
- 10 MB de espacio en disco para su instalación (110 MB si es necesario instalar Microsoft Framework)
- 256 MB de memoria RAM en adelante
- Procesador de 1.5 GHz en adelante