



**Universidad  
Zaragoza**

**Trabajo Fin de Grado**

**Modelado de un biofiltro percolador para la  
limpieza de amoníaco en corrientes de aire**

**Modeling of a bio-trickling filter for ammonia  
removal from air streams**

Autor:

Andrea Arranz Ramos.

Director:

Salvador Izquierdo Estallo

ESCUELA DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA  
2025



*A mis padres, a Irene y a Pablo.*



## RESUMEN

La creciente necesidad de gestionar de forma sostenible los residuos generados en explotaciones agroganaderas ha impulsado el desarrollo de biorrefinerías capaces de valorizar tanto corrientes líquidas y sólidas como emisiones gaseosas.

El presente Trabajo de Fin de Grado aborda el desarrollo de los modelos matemáticos necesarios para el análisis de un proceso de valorización que convierte una corriente de amoníaco en aire, proveniente de naves ganaderas, a nitrato para su uso como fertilizante. Dicho proceso forma parte de una biorrefinería que valoriza también el resto de los residuos sólidos y líquidos procedentes de explotaciones agroganaderas. El equipo clave del proceso de valorización es un filtro percolador (un sistema biológico diseñado para tratar gases contaminantes mediante la acción de microorganismos).

El biofiltro será modelado hibridando dos estrategias complementarias. Por un lado, se utilizarán balances de materia y energía, junto con las correspondientes reacciones bioquímicas, para describir el comportamiento dinámico de los procesos físicos, químicos y biológicos involucrados. Dicho modelo se basa en representar el reactor como una red de reactores ideales, y será implementado haciendo uso de la librería en Python BioSTEAM orientada al modelado y análisis tecnoeconómico de biorefinerías.

La segunda aproximación consistirá en el modelado detallado mediante técnicas de fluidodinámica computacional (CFD) de un volumen representativo elemental (REV) del biofiltro. Esto permitirá evaluar aspectos críticos como la distribución de flujo, la transferencia de masa y el tiempo de residencia, con el objetivo de encontrar las condiciones óptimas para el funcionamiento del biofiltro de forma precisa y con un bajo coste computacional.

La estrategia de modelado planteada será extensible a otros biorreactores, facilitando un análisis preciso y acelerado de los mismos. El impacto de los resultados se verá beneficiado por la difusión de estos a través de código abierto basado en BioSTEAM.

## ABSTRACT

The growing need to sustainably manage the waste generated in agricultural and livestock operations has driven the development of biorefineries capable of valorizing liquid and solid waste streams as well as gaseous emissions.

This Undergraduate's Thesis focuses on the development of mathematical models required to analyze a valorization process that converts an ammonia stream in air—originating from livestock buildings—into nitrate for use as a fertilizer. This process is part of a biorefinery that also valorizes the remaining solid and liquid waste from agricultural and livestock operations. The key equipment in the valorization process is a trickle-bed biofilter (a biological system designed to treat contaminated gases through the action of microorganisms).

The biofilter will be modeled by combining two complementary strategies. On one hand, mass and energy balances, along with the corresponding biochemical reactions, will be used to describe the dynamic behavior of the physical, chemical, and biological processes involved. This model is based on representing the reactor as a network of ideal reactors and will be implemented using the Python library BioSTEAM, which is designed for the modeling and techno-economic analysis of biorefineries.

The second approach will involve detailed modeling of a representative elementary volume (REV) of the biofilter using computational fluid dynamics (CFD) techniques. This will allow for the evaluation of critical aspects such as flow distribution, mass transfer, and residence time, with the goal of identifying optimal operating conditions for the biofilter accurately and with low computational cost.

The proposed modeling strategy will be extendable to other bioreactors, enabling precise and accelerated analysis. The impact of the results will be enhanced by disseminating them through open-source code based on BioSTEAM.

# Índice general

Índice de figuras	9
Índice de tablas	11
<b>1. Introducción</b>	<b>12</b>
1.1. Motivación . . . . .	12
1.2. Estado del arte . . . . .	13
1.3. Objetivos y alcance . . . . .	16
<b>2. Metodología</b>	<b>18</b>
2.1. Descripción del reactor . . . . .	18
2.2. Modelo cinético . . . . .	20
2.3. Modelo fluidodinámico del REV . . . . .	28
<b>3. Resultados</b>	<b>44</b>
3.1. Modelo cinético . . . . .	44
3.2. Modelo fluidodinámico del REV . . . . .	53
<b>4. Conclusiones y trabajo futuro</b>	<b>60</b>
<b>Anexos</b>	<b>67</b>
<b>A. Conceptos físico-biológicos en los balances de materia</b>	<b>68</b>
A.1. Cinética de Michaelis-Menten . . . . .	70
A.2. Ley de transferencia de masa . . . . .	73
A.3. Ley de Fick de difusión . . . . .	78
<b>B. Variación axial de concentraciones. Implementación en BioS-</b> <b>team</b>	<b>80</b>
B.1. Librería BioSteam . . . . .	80
B.2. Implementación del código . . . . .	81

<b>C. Modelo fluidodinámico 2D</b>	<b>88</b>
C.1. Geometría . . . . .	88
C.2. Mallado . . . . .	89
C.3. Condiciones de contorno . . . . .	89
C.4. Cálculo de la caída de presión . . . . .	90
C.5. Resultados . . . . .	91
<b>D. Análisis de la Configuración del Líquido: Formación de Gotas o Película en el Medio Poroso</b>	<b>96</b>
<b>E. Código en Python para DTR y gráfica de <math>k_L \cdot a \cdot \tau</math> vs Re</b>	<b>98</b>
E.1. Gráfica de DTR en el modelo cinético . . . . .	98
E.2. Gráfica de DTR en el modelo fluidodinámico . . . . .	99
E.3. Gráfica de $k_L \cdot a$ . Código en Python . . . . .	101
E.4. Gráfica de $k_L a \cdot \tau$ vs Re . . . . .	103

# Índice de figuras

1.1. Producción anual de estiércol en la UE [1] . . . . .	12
1.2. Comparación entre herramientas de modelado [13] . . . . .	15
1.3. Estructura porosa aleatoria [15] . . . . .	16
2.1. Geometría del reactor . . . . .	18
2.2. Corrientes en el PFR . . . . .	20
2.3. Cascada de CSTR frente a PFR [17] . . . . .	21
2.4. Subdivisión del reactor en etapas y procesos de difusión [18] . . . . .	22
2.5. División por zonas . . . . .	23
2.6. Esquema del experimento del trazador [21] . . . . .	27
2.7. Anillos Kaldnes [23] . . . . .	29
2.8. Anillo Kaldnes . . . . .	29
2.9. Cubo de fluido . . . . .	30
2.10. Mallado de la geometría . . . . .	31
2.11. Detalle del mallado . . . . .	32
2.12. Condiciones de contorno modelo 3D . . . . .	38
3.1. Concentraciones axiales en el caso mínimo . . . . .	48
3.2. Concentraciones axiales en el caso óptimo . . . . .	49
3.3. Concentraciones axiales en el caso base . . . . .	50
3.4. Concentraciones axiales en el caso máximo . . . . .	51
3.5. DTR con 53 CSTR . . . . .	52
3.6. Curvas DTR para CSTR y PFR ideales [20] . . . . .	52
3.7. Campo de velocidad . . . . .	53
3.8. Campo de presiones . . . . .	54
3.9. $k_L$ vs Re . . . . .	56
3.10. $k_L \cdot a$ vs Re . . . . .	56
3.11. Distribución de tiempos de residencia . . . . .	57
3.12. $\tau$ vs Re . . . . .	58
3.13. $k_L a \cdot \tau$ vs Re . . . . .	59

A.1. Esquema del concepto de sistema[17]	69
A.2. Esquema de los flujos en un sistema[17]	69
A.3. Gradientes de concentración en la transferencia de masa[17]	75
C.1. Geometría 2D	88
C.2. Mallado 2D	89
C.3. Detalle del refinamiento de malla	89
C.4. Condiciones de contorno en 2D	90
C.5. Contornos del módulo de velocidad	92
C.6. Contornos de presión estática	93
C.7. Líneas de corriente en el modelo 2D	94
D.1. Área mojada	97
E.1. Líneas de corriente	99

# Índice de tablas

3.1. Parámetros del análisis de sensibilidad del modelo cinético . .	46
C.1. Relación entre modelos . . . . .	91
C.2. Flujos másicos . . . . .	91
C.3. Flujos volumétricos . . . . .	92

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

La ganadería es el pilar fundamental en la economía rural de Europa. Sin embargo, este sector también es causante de gran parte de la contaminación mundial, con un impacto considerable en la calidad del aire, la eutrofización y el cambio climático. Y es que Europa produce anualmente más de 1400 millones de toneladas de estiércol (75 % por el sector bovino, mientras que los sectores porcino y avícola de carne producen un 12 % cada uno), emitiendo una variedad de gases que tienen diversos impactos en el medio ambiente y en la salud de los animales y los trabajadores. Los gases más destacados incluyen el amoníaco ( $NH_3$ ), el metano ( $CH_4$ ) y el óxido nítrico ( $N_2O$ ). El  $NH_3$  es un gas irritante que se acumula en espacios de cría de animales que tienen una ventilación insuficiente. La ganadería es la actividad económica que más emisiones de  $NH_3$  emite a la atmósfera en España. Según el último Inventario Nacional de Emisiones, correspondiente al año 2020, aproximadamente el 80 % de estas emisiones están relacionadas con la producción animal [2]. A nivel europeo, la ganadería es responsable de la emisión de 1.5 Mt/año  $NH_3$ . Esto constituye un problema medioambiental debido a que el  $NH_3$  contribuye, asimismo, a la formación de partículas se-

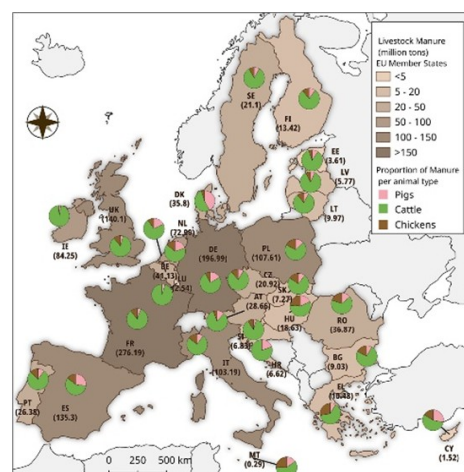


Figura 1.1: Producción anual de estiércol en la UE [1]

cundarias (aquellas que se forman en la atmósfera a partir de otros gases contaminantes: NO<sub>x</sub>, VOCs, PM<sub>2.5</sub>).

A pesar de los grandes esfuerzos realizados en las últimas décadas, la actual gestión del estiércol en tierras agrícolas como fertilizante todavía plantea un importante problema de contaminación (contaminación atmosférica [3], degradación del suelo, eutrofización de las aguas superficiales y contaminación de aguas subterráneas [4]). Por ello, la gestión del estiércol y el control de las emisiones de  $NH_3$  asociadas, suponen hoy en día un importante reto desde una perspectiva tanto tecnológica como de OneHealth [5].

Desde otra perspectiva, cabe destacar que el  $NH_3$  juega un papel crucial en la bioeconomía como materia prima esencial para la producción de fertilizantes nitrogenados. Estos fertilizantes son fundamentales para la agricultura moderna, permitiendo la producción eficiente de alimentos para una población mundial en constante crecimiento. El  $NH_3$  también es un precursor del hidrógeno, un vector energético renovable con un gran potencial para la descarbonización de la economía. El desarrollo de nuevas tecnologías para la producción y uso del  $NH_3$  puede abrir nuevas oportunidades en la bioeconomía, impulsando la innovación y la creación de empleos verdes.

Por lo anteriormente descrito, existen oportunidades para las biorrefinerías de pequeña escala que valorizen las corrientes de  $NH_3$  generadas en el sector agropecuario. Sin embargo, es necesario superar múltiples desafíos técnicos y económicos: (i) definición de procesos circulares que maximicen la recuperación y valorización del  $NH_3$ ; (ii) competitividad en la conversión de recursos; (iii) sostenibilidad ambiental de los procesos definidos; y (iv) adecuación de las tecnologías digitales para convertirlas en habilitadoras claves de dichos procesos de valorización.

## 1.2. Estado del arte

### 1.2.1. Modelo cinético

Comúnmente, el proceso de control de las emisiones contaminantes del aire es de naturaleza física o química. Sin embargo, los tratamientos biológicos se han convertido en una eficaz y económica alternativa a los sistemas de tratamiento convencionales. En concreto, la biofiltración se ha aplicado con éxito para tratar grandes corrientes de aire con bajas concentraciones de amoníaco [6], las cuales pasan a través de un lecho fijo donde los gases biodegradables

o compuestos volátiles son absorbidos en una biopelícula donde se produce, de forma simultánea, la difusión y la biodegradación aeróbica. Además, bajo las condiciones adecuadas, los biofiltros pueden ofrecer una alta eficiencia de eliminación a la vez que un proceso respetuoso con el medioambiente.

La mayor parte del trabajo encontrado en la literatura trata con modelos para condiciones estacionarias [7][8][9], mientras que lo ideal es usar modelos dinámicos, más adecuados porque los biofiltros suelen trabajar con cargas variables (por ejemplo, la concentración de los sustratos o productos). En general, se han aplicado modelos de flujo-pistón (PFR) para analizar el flujo de fluido, a pesar de que la elección del modelo de reacción ha diferido según los contaminantes y microorganismos que se utilizan. Así, aunque la cinética de primer orden irreversible es considerablemente común [7], ha habido otros estudios que han demostrado la necesidad de modelos de reacción más involucrados. Esto abre las puertas a más tipos de modelos que podrían ser explorados en el futuro, pues la aplicación de la biofiltración se está volviendo cada vez más extendida [10]. También hay que tener en cuenta que un modelo de reacción más complejo restringe las posibilidades de obtener una solución analítica del sistema de biofiltro. Sin embargo, no se muestran muchos problemas a la hora de obtener una solución numérica (necesidad del uso de Python y CFD, como en nuestro caso).

Se ha demostrado que los modelos de cinética de Monod se han aplicado con resultados satisfactorios [11][12]. En nuestro modelo se considerarán fenómenos conocidos que ocurren en la biofiltración, donde las ecuaciones matemáticas serán obtenidas a partir de los balances de materia, que incluyen procesos de advección, absorción, adsorción, difusión y biodegradación. El modelo incluye expresiones biocinéticas detalladas para el amoníaco considerando todas las inhibiciones biológicas que ocurren en el proceso de nitrificación. Este proceso consiste en la oxidación de amonio a nitrito y la oxidación de nitrito a nitrato. Dado que el crecimiento de biomasa no es considerado en este modelo, no hay procesos de descomposición para el amonio y la biomasa de nitrito oxidante.

### **1.2.2. Modelo fluidodinámico**

El modelado riguroso de los fenómenos de transporte es esencial para reproducir con precisión el rendimiento de los sistemas de biofiltración. Estudios analizaron el efecto de la integración de la dinámica de flujo de fluidos en el desarrollo de estos modelos de biorreactores, imitando su hidrodinámica y comportamiento en un reactor de biopelícula fijo. Los modelos 2D de bio-

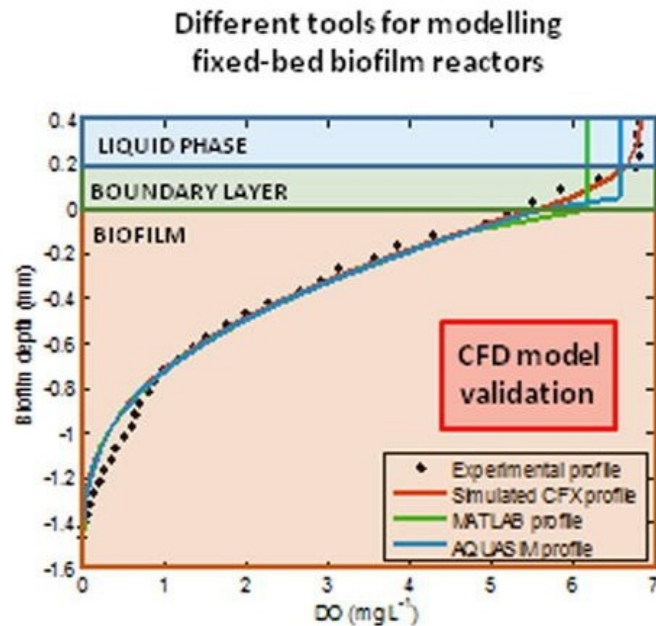


Figura 1.2: Comparación entre herramientas de modelado [13]

reactores se desarrollaron utilizando tres herramientas diferentes (AQUASIM, MATLAB y CFD), obteniendo para esta última las menores desviaciones frente a resultados experimentales. Esto resalta que las técnicas CFD son adecuadas para modelar con mayor precisión el rendimiento de los reactores con biopelícula, permitiendo el estudio detallado de todas las variables hidrodinámicas involucradas en el proceso [13]. Visualmente podemos observar dicha comparación en la imagen 1.2.

Varios modelos matemáticos se han utilizado para describir la hidrodinámica al modelar el rendimiento de biorreactores en fase líquida, desde modelos de flujo pistón o modelos ideales mixtos hasta modelos de dinámica de fluidos computacional [14], concluyendo que los modelos CFD son los más completos porque nos permiten describir la evolución espacio-temporal de fenómenos físicos y biológicos.

Los procesos de flujo de fluidos y transferencia de calor en medios porosos son multiescala. Generalmente, estos procesos se asocian con tres escalas de longitud diferentes: la escala de región, la escala de volumen representativo elemental (REV) y la escala de poros (ver imagen 1.3) [16]. Las magnitudes macroscópicas (porosidad y permeabilidad) suelen asociarse con un REV, y las magnitudes macroscópicas se definen comúnmente como el promedio

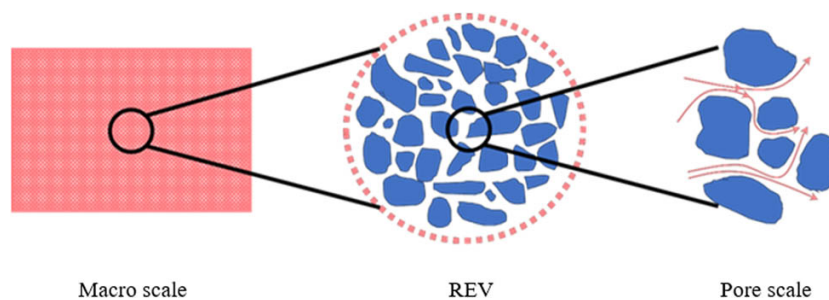


Figura 1.3: Estructura porosa aleatoria [15]

volumétrico de las magnitudes microscópicas sobre el REV. La elección de este volumen representativo es un proceso muy complejo: el REV de un medio poroso se define como el volumen mínimo sobre el cual se puede medir la magnitud de interés que arrojará un valor representativo del conjunto. Se cree que el tamaño característico del REV es mucho mayor que el de los poros (o estructuras de matriz sólida), pero considerablemente menor que el tamaño característico de la región de flujo macroscópico. Los procesos dominantes y las ecuaciones que los rigen pueden variar con las escalas, y para modelar el flujo de fluidos y la transferencia de calor en medios porosos a diferentes escalas de longitud, se deben emplear diferentes enfoques computacionales [15].

De acuerdo con lo anterior, el objetivo de este Trabajo Fin de Grado es contribuir al conocimiento existente sobre cómo la consideración de la dinámica del flujo de fluidos puede ayudar a desarrollar modelos más rigurosos para los procesos de biofiltración. Concretamente, se desarrollará un modelo de análisis de transferencia de masa y distribución de tiempos de residencia para caracterizar el comportamiento del fluido y evaluar la eficiencia del sistema.

### 1.3. Objetivos y alcance

El presente Trabajo de Fin de Grado tiene como finalidad el desarrollo de un modelo dinámico aplicado a biofiltros, orientado a predecir y optimizar la conversión de amoníaco en nitrato, con el propósito de incrementar la eficiencia y sostenibilidad del proceso. Para ello, se recurrirá a modelos basados en redes de reactores ideales, alimentados por datos experimentales proporcionados por terceros, que permitirán reproducir el comportamiento transitorio, así como la distribución axial, de los reactivos y productos en el sistema.

Inicialmente, se abordará la comprensión de los fenómenos que tienen lugar

en un biorreactor, así como la definición del mecanismo de reacción bioquímica implicado. A partir de este conocimiento, se establecerá un sistema de ecuaciones que modelice los balances de materia presentes en el biofiltro, empleando como referencia el comportamiento de reactores de mezcla completa en continuo (CSTR). Dicho modelo será implementado mediante la librería BioSteam de Python, obteniéndose así un primer esquema basado en ecuaciones diferenciales ordinarias, capaz de simular el régimen transitorio del proceso con resolución axial y con una ejecución ágil en tiempo real.

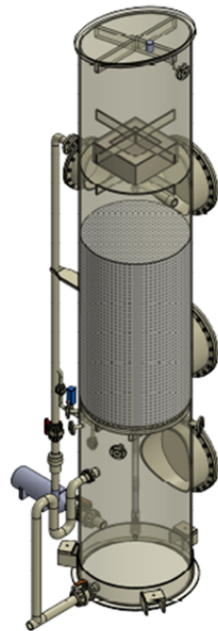
De manera complementaria, se dotará al modelo de una resolución multiescala, integrando para ello los resultados de simulaciones CFD de un volumen representativo del lecho poroso. Para el desarrollo de esta parte, se construirá la geometría del biofiltro en SolidWorks, incorporando un medio poroso conformado por una red de anillos Kaldnes, gracias a la información cedida por colaboradores. Posteriormente, se procederá al mallado de la geometría y a su adecuación a las condiciones de análisis establecidas en ANSYS Fluent, definiendo asimismo los flujos de trabajo numérico-experimental que permitan predecir las curvas del parámetro adimensional  $k_L a \cdot \tau$  frente al número de Reynolds, y optimizar así el rendimiento del sistema.

# Capítulo 2

## Metodología

### 2.1. Descripción del reactor

El sistema de estudio es un reactor tubular hecho de propileno que cuenta con un lecho poroso en el interior, compuesto por anillos Kaldnes (ver *sección 2.3. Modelo fluidodinámico del REV - Geometría*) y una torre de lavado sobre él. Las principales dimensiones se observan junto a la imagen 2.1.



- Área transversal:  $0.5 \text{ m}^2$
- Altura lecho poroso: 1.4 m
- Altura desde la base hasta el lecho: 1.573 m
- Altura desde la base hasta la ducha de líquido: 3.2 m
- Volumen total: 1500 L
- Volumen del lecho: 704 L

Figura 2.1: Geometría del reactor

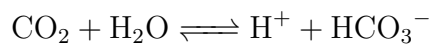
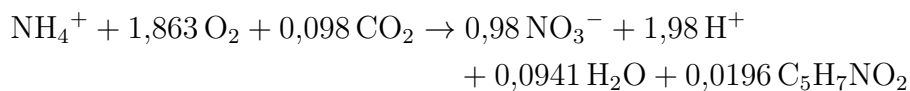
### 2.1.1. Corrientes y reacción química

El biorreactor que va a ser analizado en este trabajo tiene ciertas peculiaridades, y la más resaltada se basa en las distintas direcciones en las que circula cada flujo de sustrato y producto.

Existen dos componentes en fase gas, los sustratos de amoníaco ( $NH_3$ ) y oxígeno ( $O_2$ ), que entran desde la parte inferior del biorreactor para circular en sentido ascendente, venciendo el efecto de la gravedad, para acabar escapando por la parte superior.

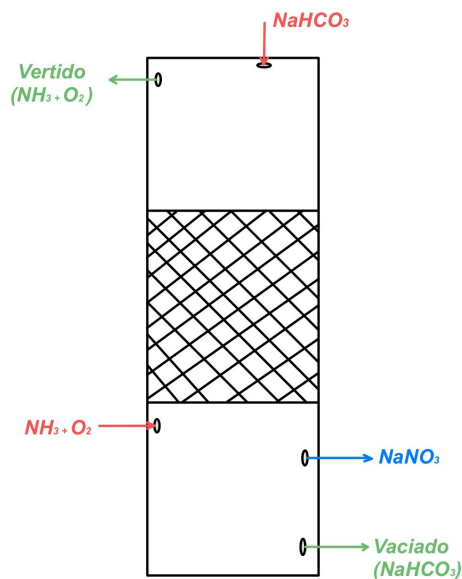
Por otra parte, el tercer sustrato, que consiste en bicarbonato de sodio ( $NaHCO_3$ ), será introducido al biorreactor por la parte superior, circulando de manera descendente, a favor del sentido de la gravedad, para abandonar el sistema por la parte inferior.

La reacción química que se produce en el biorreactor se basa en la transformación de amoníaco (posteriormente transformado a ion amonio) en nitrato de sodio (lo que es denominado reacción de **nitrificación**) en una base de bicarbonato de sodio, componente regulador de pH. Además, la reacción es aerobia, por lo que se necesita el aporte de oxígeno. El producto de la reacción entre los tres sustratos, el nitrato de sodio ( $NaNO_3$ ) se forma dentro del reactor y sale, igualmente, por la parte inferior, por lo que sigue la misma dirección que el bicarbonato. La reacción química, con sus coeficientes estequiométricos, es la siguiente:



Así, sabiendo la masa de amoníaco que entra, como es el reactivo limitante, calculamos la masa de  $CO_2$  necesaria para la reacción, teniendo en cuenta la estequiometría. Con ello, calculamos la masa y concentración de bicarbonato que se necesitan para ese  $CO_2$  y, a partir del bicarbonato, la de  $NaHCO_3$ .

Por otra parte, a partir de la masa de amoníaco, también se calcula la masa de nitrato que se forma en la reacción, y a partir del nitrato, se calcula el nitrato de sodio que se formaría.



- Caudal de gas:  $0.14 \text{ m}^3/\text{s}$
- Caudal de líquido:  $0.00991 \text{ m}^3/\text{s}$
- Concentración de amoniacó en gas: 3.6 g/hora
- Concentración de oxígeno en gas: 5.18 g/hora
- Concentración de  $\text{NaHCO}_3$  en líquido: 1.65 g/hora

Figura 2.2: Corrientes en el PFR

En la figura 2.2 se muestra un esquema de los flujos que circulan por el biorreactor de manera simplificada. A pesar de que el reactor PFR tenga tres entradas y una salida, se modelarán los CSTR con cuatro entradas y cuatro salidas, debido a la necesidad de programarlos en cadena, considerando las entradas de un reactor como las salidas del anterior. Igualmente, esto es únicamente relevante a nivel de programación del modelo.

## 2.2. Modelo cinético

### 2.2.1. Modelo del reactor

Simular la variación tanto espacial como temporal de las concentraciones de los reactivos y productos a lo largo del biorreactor resulta una tarea considerablemente ardua, tanto matemática como computacionalmente. Es por esto que se utilizan diversas aproximaciones, como la simulación de un Reactor Flujo-Pistón (PFR) como un conjunto de Reactores Continuos de Tanque Agitado (CSTR).

El rendimiento relativo de los reactores discontinuos, CSTR y PFR, puede considerarse desde un punto de vista teórico en términos de conversiones de sustrato y concentraciones de producto obtenidas utilizando recipientes de

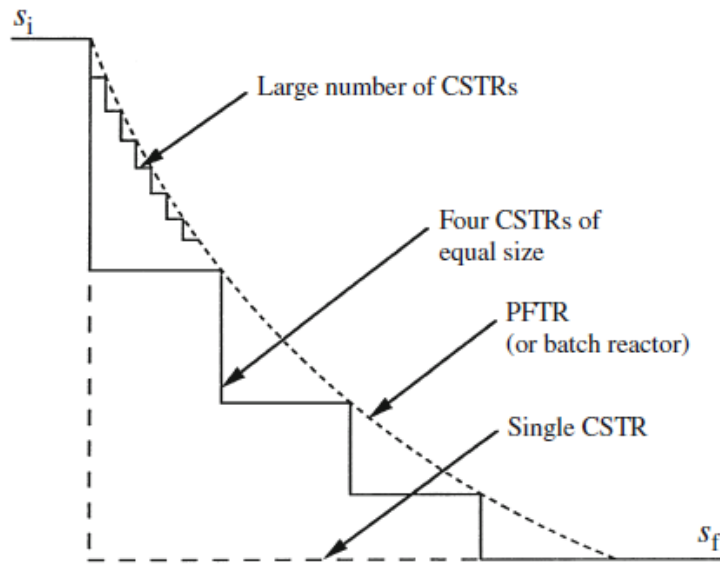


Figura 2.3: Cascada de CSTR frente a PFR [17]

igual tamaño. Se puede demostrar teóricamente que, a medida que aumenta el número de etapas en una cascada de CSTR, las características de conversión de todo el sistema se aproximan a las de un reactor de flujo pistón ideal [17], tal y como se representa de manera esquemática en la figura 2.3.

En un CSTR único y bien agitado, operado con las mismas concentraciones de entrada y salida, como las condiciones del recipiente son uniformes, se produce un cambio brusco en la concentración de sustrato tan pronto como este entra en el reactor. En una cascada de CSTR, en cambio, la concentración es uniforme en cada reactor pero se produce una disminución escalonada entre cada etapa. Así, a mayor número de unidades en la cascada, el perfil de concentración se acerca más al comportamiento de flujo pistón.

Los beneficios asociados con determinados diseños de reactores o modos de operación dependen de la cinética de reacción. Para reacciones de orden cero, no existe diferencia entre reactores CSTR y PFR en términos de tasa de conversión global. Sin embargo, para la mayoría de las reacciones (incluyendo las de primer orden y las que siguen la cinética de Michaelis-Menten, como en el caso de este análisis), la velocidad de reacción disminuye a medida que lo hace la concentración de sustrato, en reactores PFR. Por tanto, dicha velocidad es alta al inicio, para posteriormente caer de forma gradual a medida que se consume el sustrato. En cambio, en un CSTR, el sustrato que ingresa

se diluye de inmediato hasta la concentración final o estacionaria, por lo que la velocidad de reacción es relativamente baja en todo el reactor.

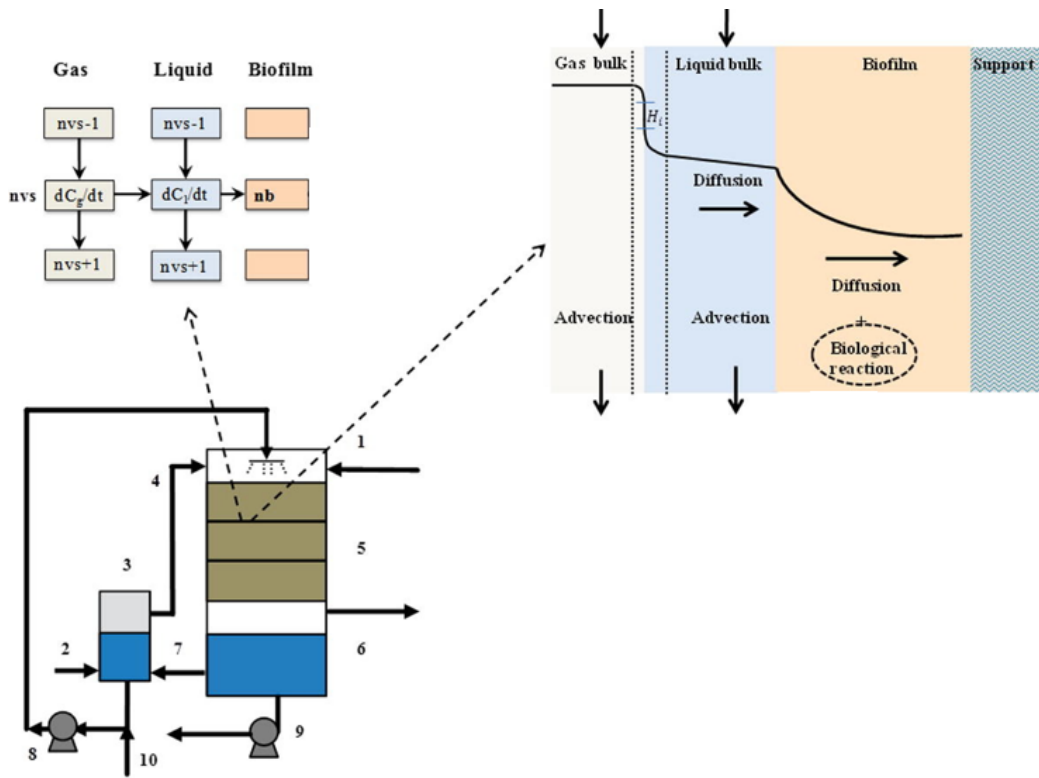


Figura 2.4: Subdivisión del reactor en etapas y procesos de difusión [18]

En cada etapa se incluirán tres dominios: la fase gas, correspondiente al amoníaco y al oxígeno; la fase líquida, donde aparecerá el bicarbonato de sodio y el nitrato de sodio, y la fase biofilm, que es donde tendrán lugar las reacciones químicas. Se producirá una difusión desde la fase gas a la fase líquida y, posteriormente, otra difusión hacia la biopelícula [18]. La separación en etapas y proceso de difusión se observa en la figura 2.4.

Además de esta aproximación en etapas, llevaremos a cabo una segmentación complementaria en tres zonas físicas del biofiltro, ya que ha sido demostrado que este enfoque garantiza una mayor fiabilidad en los resultados [19].

Las ventajas que se obtienen de esta separación de la estructura del reactor se basan en una mayor precisión, pues captura la dinámica de flujo en distintas zonas en lugar de asumir un solo comportamiento global; la con-

sideración de efectos locales, un mejor ajuste a datos experimentales, sobre todo en relación con el tiempo de residencia del gas, y es posible diferenciar entre distintos materiales de empaque.

Dichas zonas son las siguientes:

### Zona 1. Inferior al lecho poroso

Esta zona actúa como un espacio de mezcla antes de que el fluido entre al material de empaquetamiento (anillos Kaldnes). Se modela como dos reactores CSTR, reflejando un mayor grado de dispersión y mezcla en este área.

### Zona 2. Lecho poroso

Es la zona principal donde ocurre la transferencia de masa y la biodegradación de los contaminantes. Se modelará como un PFR a través de una serie de 50 CSTR en línea.

### Zona 3. Superior al lecho poroso

Es una zona similar a la primera, y se trata de una sección que permite la homogeneización del flujo antes de salir del reactor. Se representa como un único CSTR debido a su comportamiento de mezcla.

A continuación, se presentan los balances de materia realizados a las distintas fases del dominio. El origen matemático y físico de las expresiones que se verán a continuación, así como la explicación de los distintos términos que intervienen, se recoge en el *Anexo I: Conceptos físico-biológicos en los balances de materia*.

## 2.2.2. Balance a la fase gas

El balance a la fase gas cuenta con un elemento de variación de la tasa de entrada y de salida del elemento  $i$  en el volumen de control  $V$  y un término

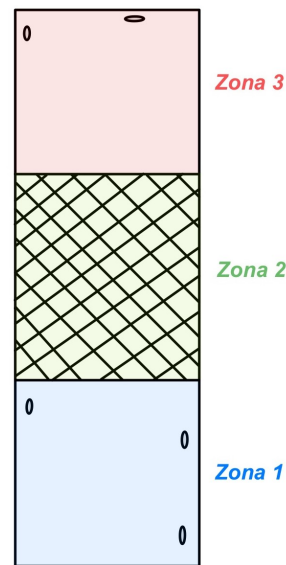


Figura 2.5: División por zonas

de transferencia de masa de la fase gas a la líquida.

$$\frac{dC_i^G}{dt} = \frac{C_{in,i}^G - C_i^G}{V} - k_L a_i \cdot (C_i^{interfase} - C_i^L) \quad (2.1)$$

Donde:

- $C_{in,i}^G$  es la concentración de entrada del elemento i gas.
- $C_i^G$  es la concentración del elemento i en la fase gaseosa.
- $V$  es el volumen del reactor.
- $k_L a_i$  es el coeficiente de transferencia de masa del elemento i.
- $C_i^{interfase}$  es la concentración en la interfase del elemento i.
- $C_i^L$  es la concentración del elemento i en la fase líquida.

El subíndice i hace referencia tanto al  $NH_3$  como al  $O_2$ , los dos elementos que se encuentran en fase gas.

La concentración en la interfase del elemento i se calcula utilizando la Ley de Henry:

$$C_i^{interfase} = k_{H,i} \cdot P_i \quad (2.2)$$

Donde:

- $k_{H,i}$  es la constante de Henry del elemento i.
- $P_i$  es la presión parcial del elemento i en el líquido.

### 2.2.3. Balance a la fase líquida

En el balance a la fase líquida aparece un término de variación entre la tasa de entrada y de salida del elemento i a un volumen de control V, un término de transferencia de masa de la fase gas a la líquida, y un término de difusión, basado en la Ley de Fick.

$$\frac{dC_i^L}{dt} = \frac{C_{in,i}^L - C_i^L}{V} + k_L a_i \cdot (C_i^{interfase} - C_i^L) - \frac{a \cdot D_i}{\phi \cdot \delta_L} \cdot (C_i^L - C_i^B) \quad (2.3)$$

Donde:

- $C_{in,i}^L$  es la concentración de entrada del elemento i líquido.

- $C_i^L$  es la concentración del elemento i en la fase líquida.
- $V$  es el volumen del reactor.
- $k_L a_i$  es el coeficiente de transferencia de masa del elemento i.
- $C_i^{\text{interfase}}$  es la concentración en la interfase del elemento i.
- $C_i^L$  es la concentración del elemento i en la fase líquida.
- $a$  es el área específica.
- $D_i$  es el coeficiente de difusión del elemento i.
- $\phi$  es la porosidad.
- $\delta_L$  es el grosor efectivo del biofilm.
- $C_i^L$  y  $C_i^B$  son las concentraciones en las fases líquida y de biofilm, respectivamente, del componente i.

En este caso, el subíndice i hace referencia al amoníaco y al oxígeno que han difundido de la fase gas a la fase líquida.

Para el caso del  $NaHCO_3$  y  $NaNO_3$ , elementos que únicamente se encuentran en la fase líquida, no difunden desde la fase gas, en el balance no aparece el término de transferencia de masa.

$$\frac{dC_i^L}{dt} = \frac{C_{\text{in},i}^L - C_i^L}{V} - \frac{a \cdot D_i}{\phi \cdot \delta_L} \cdot (C_i^L - C_i^B) \quad (2.4)$$

#### 2.2.4. Balance a la biopelícula

En la biopelícula aparecen dos tipos de ecuaciones: el balance de masa para los elementos de la fase líquida que difunden al biofilm y el balance de la biomasa en el biofilm. La primera expresión es la siguiente:

$$\frac{dC_i^B}{dt} = \frac{a \cdot D_i}{\phi \cdot \delta_L} \cdot (C_i^L - C_i^B) - \eta \cdot \mu \quad (2.5)$$

Donde:

- $a$  es el área específica.
- $D_i$  es el coeficiente de difusión del elemento i.

- $\phi$  es la porosidad.
- $\delta_L$  es el grosor efectivo del biofilm.
- $C_i^L$  y  $C_i^B$  son las concentraciones en las fases líquida y de biofilm, respectivamente, del componente  $i$ .
- $\eta$  es el factor de eficiencia.
- $\mu$  es la tasa de reacción, que se modela utilizando la cinética de Michaelis-Menten.

$$\mu = v_{\max} \cdot \frac{C_1}{K_{m_1} + C_1} \cdot \frac{C_2}{\alpha_2 \cdot (K_{m_2} + C_2)} \quad (2.6)$$

Donde:

- $v_{\max}$  es la tasa máxima de reacción.
- $C_1$  y  $C_2$  son las concentraciones de los sustratos (la concentración en el biofilm y el oxígeno).
- $K_{m_1}$  y  $K_{m_2}$  son las constantes de Michaelis-Menten.
- $\alpha_2$  es el coeficiente estequiométrico para el sustrato 2 (oxígeno).

La segunda expresión, para la biomasa del biofilm, toma la siguiente forma:

$$\frac{dC_{\text{Biofilm}}}{dt} = \frac{a \cdot D_{NH_3}}{\phi \cdot \delta_L} \cdot (C_{NH_3}^L - C_{NH_3}^B) + \frac{a \cdot D_{O_2}}{\phi \cdot \delta_L} \cdot (C_{O_2}^L - C_{O_2}^B) - \eta \cdot \mu \quad (2.7)$$

Donde:

- $a$  es el área específica.
- $D_{NH_3}$  es el coeficiente de difusión del amoníaco.
- $D_{O_2}$  es el coeficiente de difusión del oxígeno.
- $\phi$  es la porosidad.
- $\delta_L$  es el grosor efectivo del biofilm.
- $C_{NH_3}^L$  y  $C_{NH_3}^B$  son las concentraciones en las fases líquida y de biofilm, respectivamente, del amoníaco.

- $C_{O_2}^L$  y  $C_{O_2}^B$  son las concentraciones en las fases líquida y de biofilm, respectivamente, del amoníaco.
- $\eta$  es el factor de eficiencia.
- $\mu$  es la tasa de reacción, que se modela utilizando la cinética de Michaelis-Menten.
- $C_{\text{Biofilm}}$  es la concentración de biomasa en el biofilm.

### 2.2.5. Distribución de tiempos de residencia

Para obtener la distribución de tiempos de residencia partiendo del modelo cinético, llevaremos a cabo el experimento del trazador (*tracer experiment* [20]). Y es que la DTR puede determinarse inyectando un trazador inerte al reactor en el tiempo  $t=0$ . La concentración del trazador,  $C$ , en la corriente de salida es medida como función del tiempo. La figura 2.6 muestra un esquema del proceso.

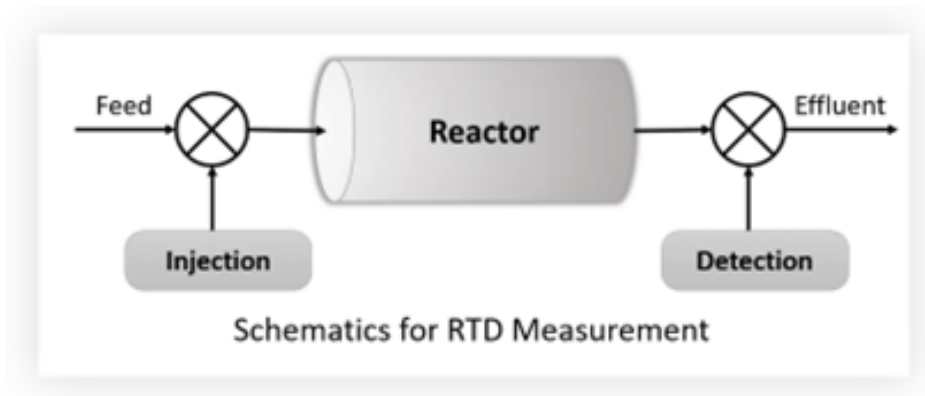


Figura 2.6: Esquema del experimento del trazador [21]

Cabe destacar que el trazador debe ser no reactivo, fácilmente detectable y tener propiedades físicas similares a la mezcla del reactor, para que así únicamente se esté moviendo a través del reactor sin reaccionar con otros compuestos. Esto implica que su concentración cambia únicamente debido al flujo y la mezcla, pero no por consumo o generación química. Es por eso que en el balance utilizado para obtener la concentración a la salida no se incluye ningún término de reacción química.

Los dos métodos más usados de inyección son el pulso y el escalón. En este caso, utilizaremos el primero. Para ello, definimos un sistema de ecuaciones diferenciales que describe la concentración del trazador en cada CSTR:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_{i-1} - C_i}{\tau} \quad (2.8)$$

Esta expresión representa la ecuación de balance de masa: el cambio de concentración en el  $i$ -ésimo CSTR es debido al flujo de entrada desde el  $i-1$  y la salida propia. En el caso del primer CSTR, únicamente se tiene en cuenta la concentración de entrada.

## 2.3. Modelo fluidodinámico del REV

Para poder modelar el biorreactor y estudiar las variables hidrodinámicas involucradas en el proceso de producción de nitrato de sodio, estudiando el efecto del fenómeno de transporte de masa para así poder predecir las variaciones de concentración y la eficacia del proceso, crearemos un modelo fluidodinámico el proceso en ANSYS Fluent.

### 2.3.1. Geometría

Con el objeto de reducir la complejidad computacional pero a la vez obtener resultados precisos y generalizables a condiciones reales de operación, utilizaremos el llamado Volumen Representativo Elemental (REV, del inglés *Representative Elementary Volume*) que, en este caso, está conformado por un cubo lleno de fluido con cuatro anillos Kaldnes en su interior (ver *subsección 3.1.1. Lecho poroso. Anillos Kaldnes*), distribuidos de manera aleatoria para simular la porosidad máxima.

Estos elementos, fabricados en polietileno de alta densidad (HDPE), presentan una geometría cilíndrica con estructuras internas en forma de aletas o paletas, lo que permite disponer de una amplia superficie específica protegida para la formación del biofilm. A continuación, se adjunta una imagen real de un grupo de anillos Kaldnes, de tipo K1, como los que se han incluido en el biorreactor.

Los anillos kaldnes son un medio eficiente para nitrificación y desnitrificación en comparación con otros medios como los anillos Norton o césped artificial Finturf [22]. Y es que su estructura permite un buen flujo de agua y oxígeno,

evitando problemas de obstrucción.

Su diseño permite que, al estar en suspensión en el medio líquido, los anillos se mantengan en constante movimiento gracias a la agitación o aireación del sistema, lo cual favorece la renovación del sustrato en la interfase biofilm-líquido. Además, este movimiento propicia una autolimpieza parcial [24] de las biopelículas envejecidas mediante la cizalladura derivada de los choques entre anillos y con las paredes del reactor, evitando la sobreacumulación de biomasa inactiva [25].

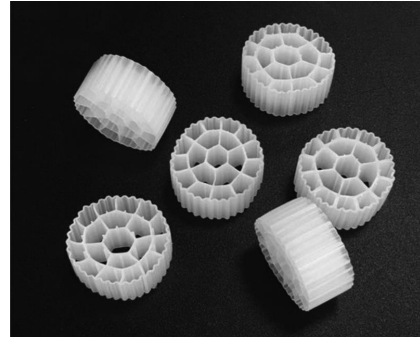
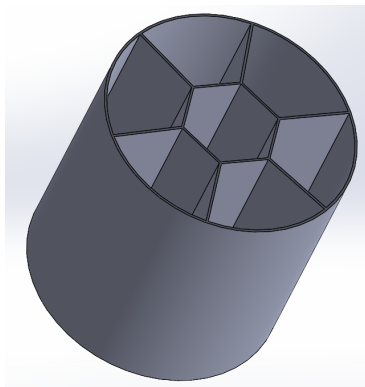


Figura 2.7: Anillos Kaldnes [23]

Una de las principales ventajas de este sistema es su alta superficie específica por unidad de volumen, lo cual permite incrementar significativamente la cantidad de biomasa en el reactor sin necesidad de aumentar su volumen total.

Para la simulación CFD se ha creado un modelo simplificado de los anillos Kaldnes en SolidWorks, pudiéndose observar su geometría en la figura 2.8. Se trata de un cilindro cuyas medidas se observan a la derecha de la imagen.



- **Diámetro exterior:** 10.2 mm
- **Diámetro hexágono:** 4 mm
- **Altura:** 10 mm
- **Espesor paredes:** 0.1 mm
- **Volumen ocupado:**  $59.63 \text{ mm}^3$

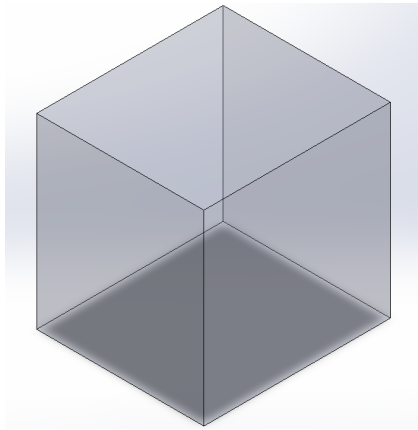
Figura 2.8: Anillo Kaldnes

Para representar el constante movimiento de los anillos en el biorreactor y, en consecuencia, la distribución aleatoria de los mismos, creamos un volumen

representativo basado en un cubo de fluido conteniendo a 4 anillos Kaldnes, ya que se consideró que con dicha cantidad era posible crear una zona representativa del lecho poroso.

Colocamos los anillos en dos filas, orientados en distintos ángulos para simular una mayor aleatoriedad y conseguir la máxima porosidad. Dicha porosidad la podemos calcular teniendo en cuenta el volumen del cubo y el volumen de cada anillo, dato que puede ser extraído del propio programa SolidWorks y que ha sido mostrado en la figura 2.8.

En cuanto al volumen del cubo, se calcula manualmente como se indica a continuación en la figura 2.9.



- **Dimensiones:**  $29 \times 29 \times 26$  [mm]
- **Volumen:**  $29 \cdot 29 \cdot 26 = 21866 \text{ mm}^3$

Figura 2.9: Cubo de fluido

Definimos la porosidad, o fracción de espacios vacíos, como la relación que existe entre el volumen de espacios vacíos y el volumen total. El primer término se corresponde con el volumen del cubo que no está ocupado por los anillos, y será por donde circule el fluido. Este se calcula sustrayendo el volumen de los cuatro anillos al volumen total del cubo calculado previamente.

$$\begin{aligned}
 \text{Volumen espacios vacíos} &= \text{Volumen cubo} - 4 \cdot \text{Volumen anillo} \\
 &= 21866 - 4 \cdot 59,63 \\
 &= 21627,48 \text{ mm}^3
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

$$\text{Porosidad} = \frac{\text{Volumen espacios vacíos}}{\text{Volumen total}} = \frac{21627,48}{21866} = 0,9891 \tag{2.10}$$

Por lo tanto, con esta distribución, la porosidad será del **98.91 %**

### 2.3.2. Mallado

Para la realización de las simulaciones numéricas se ha seleccionado una estrategia de mallado basada en la tecnología **Poly-Hexcore** implementada en ANSYS Fluent. Esta metodología se fundamenta en el empleo de hexaedros octree de alta calidad en la región central del dominio computacional, combinados con prismas isotrópicos en las zonas próximas a las paredes, conectados mediante elementos poliédricos generados automáticamente mediante la tecnología *Mosaic<sup>TM</sup>*.

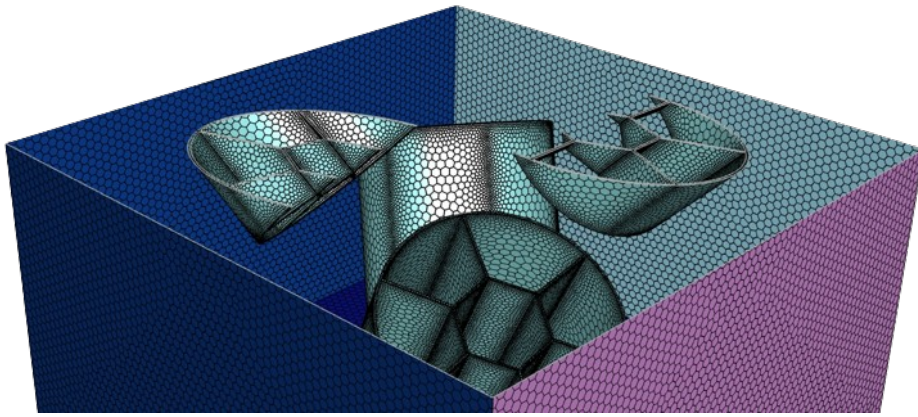


Figura 2.10: Mallado de la geometría

La elección de este tipo de mallado se justifica principalmente por sus ventajas demostradas en términos de eficiencia computacional y precisión numérica. Según estudios previos, como el realizado en el marco del 3rd AIAA CFD High-Lift Prediction Workshop [26], la utilización de mallas Poly-Hexcore permite reducir entre un 20 % y un 50 % el número total de elementos respecto a las configuraciones Hexcore convencionales, sin que ello suponga una pérdida significativa en la calidad de los resultados. En consecuencia, se obtiene una disminución del tiempo de cálculo aproximada del 10 % al 50 %, dependiendo de la complejidad geométrica y de las condiciones de contorno específicas del caso.

Además, la capacidad de los elementos poliédricos Mosaic para conectarse de forma conforme y automática entre regiones de malla estructurada (octree hexaedros) y regiones no estructuradas (prismas en la capa límite) permite generar mallas de alta calidad en geometrías complejas.

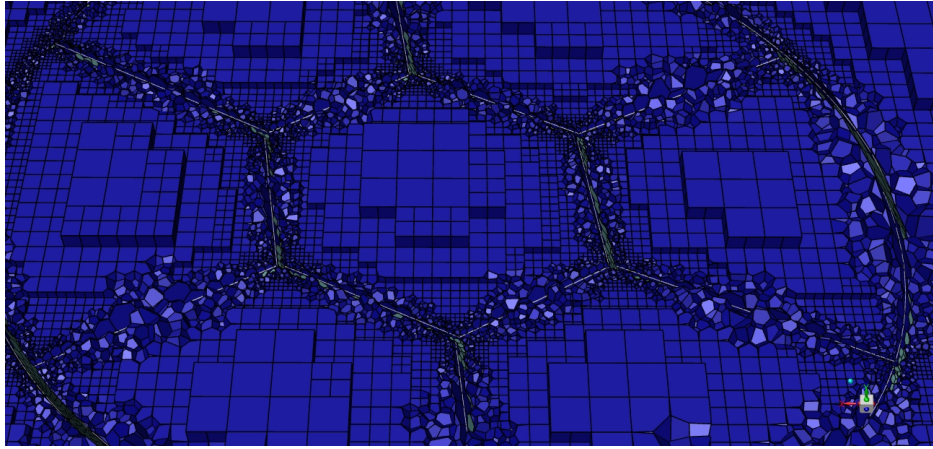


Figura 2.11: Detalle del mallado

### 2.3.3. Materiales

En el proceso de nitrificación llevado a cabo en el biorreactor se han empleado los siguientes compuestos químicos, que actúan como sustratos, fuente de oxígeno y agente regulador del pH:

- **Amoníaco ( $NH_3$ ):** se utiliza como sustrato principal del proceso. Se introduce en el reactor en forma de gas comprimido, actuando como fuente de nitrógeno reducido para las bacterias nitrificantes. Durante la reacción, el amoníaco es oxidado inicialmente a nitrito y posteriormente a nitrato.
- **Oxígeno ( $O_2$ ):** suministrado en fase gaseosa mediante una bombona de oxígeno comprimido conectada al sistema de aireación del biorreactor. El oxígeno actúa como aceptor de electrones en las reacciones de oxidación del amoníaco, siendo esencial para el metabolismo de las bacterias nitrificantes.
- **Bicarbonato de sodio ( $NaHCO_3$ ):** se introduce en el medio en forma de disolución acuosa y actúa como agente regulador del pH y fuente adicional de carbono inorgánico para el crecimiento bacteriano. Durante el proceso de nitrificación se genera ácido nítrico como subproducto, lo que tiende a acidificar el medio; el bicarbonato permite mantener el pH en valores óptimos para la actividad microbiana.

- **Agua destilada** ( $H_2O$ ): utilizada como disolvente en la preparación de las soluciones de bicarbonato de sodio y para mantener el volumen de trabajo dentro del biorreactor.

Estos compuestos permiten llevar a cabo de forma controlada el proceso de conversión biológica de amoníaco a nitrato en condiciones aerobias, manteniendo el equilibrio de pH y oxígeno disuelto necesario para garantizar la viabilidad y eficacia de las poblaciones microbianas implicadas.

Por simplicidad en las simulaciones, y para evitar la creación de nuevas especies como el bicarbonato de sodio, únicamente simularemos el dominio multifásico con aire (equivalente a la mezcla gas entre oxígeno y amoníaco) y agua (equivalente al bicarbonato de sodio).

### 2.3.4. Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones que se resuelven son la ecuación de continuidad y de momento para la mezcla; la ecuación de fracción de volumen para la fase secundaria y expresiones algebraicas para las velocidades relativas. A continuación, desglosamos dichas ecuaciones.

#### Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad para la mezcla es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m) = 0 \quad (2.11)$$

donde  $\vec{v}_m$  es la velocidad media ponderada en masa:

$$\vec{v}_m = \frac{\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_k}{\rho_m} \quad (2.12)$$

y  $\rho_m$  es la densidad de la mezcla:

$$\rho_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \quad (2.13)$$

donde  $\alpha_k$  es la fracción de volumen de la fase  $k$ .

### Ecuación de cantidad de movimiento

La ecuación de cantidad de movimiento para la mezcla se obtiene sumando las ecuaciones de momento individuales de todas las fases. Se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \vec{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \vec{v}_m) = & -\nabla p + \nabla \cdot \mu_m \left[ (\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_m \mathbf{I} \right] \\ & + \rho_m \vec{g} + \vec{F} - \nabla \cdot \left( \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k} \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde  $n$  es el número de fases,  $\vec{F}$  es una fuerza de cuerpo, y  $\mu_m$  es la viscosidad de la mezcla:

$$\mu_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k \quad (2.15)$$

La velocidad de arrastre de la fase secundaria  $k$  se define como:

$$\vec{v}_{dr,k} = \vec{v}_k - \vec{v}_m \quad (2.16)$$

### Ecuación de la fracción de volumen para la fase secundaria

A partir de la ecuación de continuidad para la fase secundaria  $p$ , se puede obtener la ecuación de fracción volumétrica para dicha fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_p \rho_p) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_m) = -\nabla \cdot (\alpha_p \rho_p \vec{v}_{dr,p}) + \sum_{q=1}^n (\dot{m}_{qp} - \dot{m}_{pq}) \quad (2.17)$$

### Velocidad relativa y velocidad de deslizamiento

La velocidad relativa se define como la velocidad de una fase secundaria ( $p$ ) respecto a la velocidad de la fase primaria ( $q$ ):

$$\vec{v}_{pq}^{\text{rel}} = \vec{v}_p - \vec{v}_q \quad (2.18)$$

La fracción másica de cualquier fase ( $k$ ) se define como:

$$c_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho_m} \quad (2.19)$$

La velocidad de deslizamiento y la velocidad relativa ( $\vec{v}_{pq}^{\text{rel}}$ ) están conectadas por la siguiente expresión:

$$\vec{v}_{dr,p} = \vec{v}_{pr}^{\text{rel}} - \sum_{k=1}^N c_k \vec{v}_{kq}^{\text{rel}} \quad (2.20)$$

donde  $\vec{v}_{kq}^{\text{rel}}$  es la velocidad de la fase  $k$  relativa a la fase  $q$ .

Se utiliza una formulación algebraica para el deslizamiento, basada en el supuesto básico de prescribir una relación algebraica para la velocidad relativa, suponiendo que se alcanza un equilibrio local entre las fases sobre una escala espacial corta [27]. La forma de la velocidad relativa es dada por :

$$\vec{v}_{pq}^{\text{rel}} = \frac{\tau_p}{f_{\text{arrastre}}} \left( \frac{\rho_p - \rho_m}{\rho_p} \right) \vec{a} \quad (2.21)$$

donde  $\tau_p$  es el tiempo de relajación de la partícula:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d^2}{18\mu_q} \quad (2.22)$$

$d$  es el diámetro de las partículas (o burbujas o gotas) de la fase secundaria  $p$ ,  $\vec{a}$  es la aceleración de la partícula secundaria. La función de arrastre por defecto  $f_{\text{arrastre}}$  se toma de Schiller y Naumann [28]:

$$f_{\text{arrastre}} = \begin{cases} 1 + 0,15 \text{Re}^{0,687} & \text{Re} \leq 1000 \\ 0,0183 \text{Re} & \text{Re} > 1000 \end{cases} \quad (2.23)$$

y la aceleración  $\vec{a}$  tiene la forma:

$$\vec{a} = \vec{g} - (\vec{v}_m \cdot \nabla) \vec{v}_m - \frac{\partial \vec{v}_m}{\partial t} \quad (2.24)$$

La forma más simple del modelo algebraico de deslizamiento es el llamado modelo de flujo de deriva, en el cual la aceleración de la partícula se da por la gravedad y/o una fuerza centrífuga, y el tiempo de relajación de la partícula se modifica para tener en cuenta la presencia de otras partículas.

En flujos turbulentos, la velocidad relativa debería contener un término de difusión debido a la dispersión que aparece en el impulso para la fase dispersa. ANSYS Fluent añade esta dispersión a la velocidad relativa:

$$\vec{v}_{pq}^{\text{rel}} = \left( \frac{\rho_p - \rho_m}{\rho_p} \right) \frac{d^2}{18\mu_q f_{\text{arrastre}}} \vec{a} - \frac{\eta_t}{\sigma_t} \left( \frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_q}{\alpha_q} \right) \quad (2.25)$$

donde  $\sigma_t$  es un número de Prandtl/Schmidt establecido en 0,75 y  $\eta_t$  es la difusividad turbulenta. Esta difusividad se calcula a partir de la correlación de velocidad fluctuante continuo-dispersa, tal que:

$$\eta_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \left( \frac{\gamma_y}{1 + \gamma_y} \right) (1 + C_\beta \zeta_y^2)^{-1/2} \quad (2.26)$$

$$\zeta_y = \frac{|\vec{v}_{pq}^{\text{rel}}|}{\sqrt{2/3} k} \quad (2.27)$$

donde  $\gamma_y$  es la relación temporal entre la escala de tiempo de los remolinos turbulentos energéticos afectados por el efecto de cruce de trayectorias y el tiempo de relajación de la partícula,  $C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \theta$ , y

$$\cos \theta = \frac{(\vec{v}_{pq}^{\text{rel}} \cdot \vec{v}_p)}{|\vec{v}_{pq}^{\text{rel}}| |\vec{v}_p|}$$

### Turbulencia. Modelo SST k- $\omega$

El modelo de turbulencia k- $\omega$  SST (Shear-Stress Transport) es una formulación URANS (Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes) mejorada que permite la resolución del espectro turbulento en condiciones de flujo inestable. Es un modelo empírico basado en ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta ( $k$ ) y la tasa de disipación específica ( $\omega$ ). Incorpora todas las mejoras del modelo k- $\omega$  BSL (Baseline) y, además, considera el transporte de la tensión de cizallamiento turbulenta en la definición de la viscosidad turbulenta

La ecuación de la Energía Cinética Turbulenta ( $k$ ) es la siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i k) &= G_k - \rho \beta^* k \omega \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \end{aligned} \quad (2.28)$$

Y la ecuación de la Tasa de Disipación Específica ( $\omega$ ):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i \omega) &= \alpha_\omega G_k - \rho \beta \omega^2 \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \\ &+ (1 - F_1) \frac{2\rho}{\sigma_{\omega 2}} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.29)$$

### 2.3.5. Modelos multifásicos

Dado que el sistema objeto de estudio consiste en un flujo multifásico gas-líquido a través de un lecho poroso, ha sido necesario recurrir a un modelo de simulación adecuado para representar correctamente la interacción entre ambas fases.

Debemos conocer la proporción en la que se encuentra cada fase, pues esto condicionará el tipo de modelo a utilizar. Para ello, utilizaremos los datos de caudal, proporcionados por los colaboradores.

- El caudal de gas (aire) es de  $0.14 \text{ m}^3/\text{s}$
- El caudal de líquido es de  $9.91 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$

Por lo tanto, la relación entre la fase gas y la líquida es:

$$\frac{Fase\ líquida}{Fase\ gas} = \frac{5,78 \cdot 10^{-8}}{0,14} = 0,066 = 6,6\% \quad (2.30)$$

Por lo tanto, la fase líquida ocupa 0.066 veces la fase gas, lo que se traduce en la presencia de pequeñas gotas de fase líquida y una pequeña película en un medio continuo de gas. Para este tipo de problema, Ansys Fluent proporciona los modelos Volume of Fluid (VOF), Mixture y Euleriano, así como el Discrete Phase Model (DPM) [28].

Como las gotas de agua están dispersas en el aire continuo, los modelos Euler-Euler (Mixture y Eulerian) son adecuados cuando las fases se tratan como continuos interpenetrantes y las fases se mezclan o separan, a diferencia del VOF, que rastrea interfaces definidas. El DPM podría ser una opción, pero elegimos los modelos Euler-Euler.

Es esperable que las gotas de agua, incluso si son pequeñas, se muevan a una velocidad diferente al aire circundante debido al arrastre y la gravedad (slip velocity). El modelo Mixture está diseñado para manejar esta diferencia de velocidades mediante expresiones algebraicas para las velocidades relativas. Aunque el modelo Euleriano también lo hace resolviendo ecuaciones de cantidad de movimiento para cada fase, el Mixture lo logra con un costo computacional menor. Este último modelo se presenta como un equilibrio razonable entre precisión y eficiencia computacional, lo que lo hace adecuado

para resolver el caso de estudio.

El modelo elegido es un modelo multifásico simplificado, diseñado para dos o más fases que se tratan como continuos interpenetrantes. Este modelo resuelve la ecuación de cantidad de movimiento, de continuidad y de energía de la mezcla, las ecuaciones de fracción de volumen para las fases secundarias y expresiones algebraicas para las velocidades relativas (o de deslizamiento). Puede modelar flujos donde las fases se mueven a velocidades diferentes o a la misma velocidad. Resuelve un menor número de ecuaciones que el modelo Euleriano, siendo menos costoso computacionalmente.

### 2.3.6. Condiciones de contorno

Las siguientes condiciones de contorno permiten replicar las condiciones de operación deseadas y aprovechar las simetrías del sistema para reducir el coste computacional.

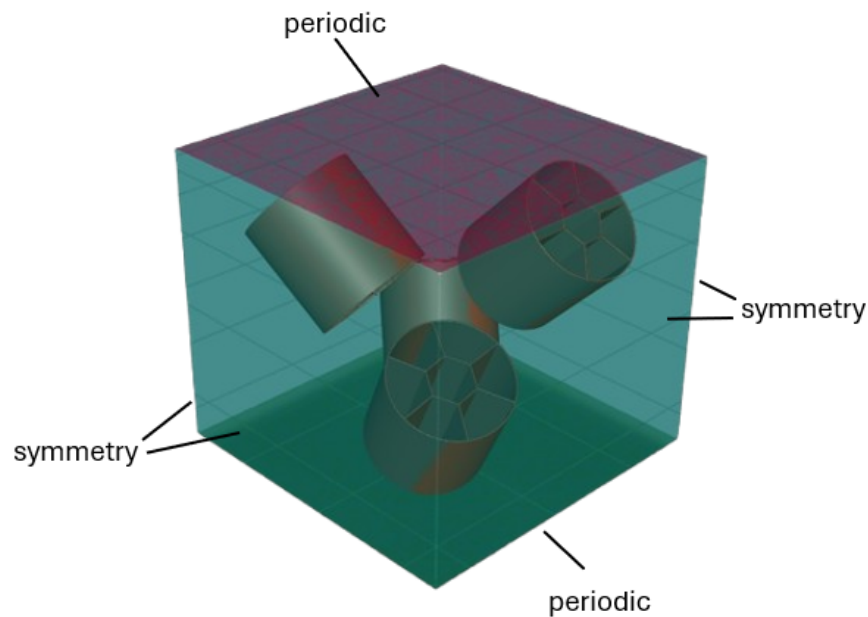


Figura 2.12: Condiciones de contorno modelo 3D

Se ha aplicado una condición de contorno de tipo *periodic* entre las caras inferior y superior del dominio (*inlet* y *outlet*, respectivamente). Esto permite simular un flujo continuo a través del volumen representativo, de manera que las propiedades del fluido que abandona el dominio por la cara superior se

reintroducen en la cara inferior.

Además, para imponer un caudal másico concreto, proporcionado por colaboradores y de valor igual a 0.168 kg/s (que, en el volumen representativo equivale a 0.00028 kg/s), se define un gradiente de presión entre ambas caras periódicas. El valor de dicho gradiente se ha determinado de manera iterativa mediante simulaciones 2D, para reducir el coste computacional (ver *Anexo III: Modelo fluidodinámico 2D*). El valor de dicho gradiente es de **847 Pa/m**.

Por otra parte, las cuatro caras laterales del cubo han sido configuradas con una condición de contorno de tipo *symmetry*, lo cual implica que no existe flujo normal a dichas caras, y que el gradiente normal de las propiedades del fluido (presión, velocidad, etc.) es nulo.

### 2.3.7. Solver

Para la resolución del problema CFD se ha empleado ANSYS Fluent, utilizando un enfoque de flujo estacionario, con un solver pressure-based y formulación en velocidad absoluta. Esta configuración es la más adecuada para flujos incompresibles o débilmente compresibles, como el del caso tratado.

El solver pressure-based resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes mediante una formulación que parte del cálculo de la velocidad a partir de un campo de presión que se corrige iterativamente. En este trabajo se ha utilizado una formulación segregada, donde las ecuaciones de conservación (continuidad, cantidad de movimiento, energía y ecuaciones de turbulencia) se resuelven de manera independiente en cada iteración, y se acoplan mediante el algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). Este proceso de solución es robusto y eficiente para casos donde no se requiere acoplamiento fuerte entre las variables.

El flujo se ha modelado utilizando una formulación en velocidad absoluta, adecuada para flujos sin movimiento relativo (por ejemplo, sin componentes rotatorias como en turbomáquinas). Esta formulación considera la velocidad del fluido en un sistema de referencia inercial.

En cuanto a los métodos de discretización, se ha utilizado el esquema Second Order Upwind para los términos convectivos, lo cual proporciona una mayor precisión respecto al primer orden sin comprometer la estabilidad. Para la interpolación de la presión se empleó el esquema Standard, y para el gradiente se usó el método Least Squares Cell Based.

La solución se consideró convergida cuando los residuos de las ecuaciones de momento, continuidad y turbulencia descendieron por debajo de  $10^{-3}$ , y cuando las variables físicas monitorizadas (como presión y velocidad en puntos clave del dominio) mostraron un comportamiento estable.

### 2.3.8. Cálculo de $k_L a$

La eficiencia con la que el aire pasa de la fase gas a la fase líquida para poder difundir posteriormente al biofilm es fundamental para el rendimiento del proceso biológico que se desarrolla en el interior del biorreactor. Este fenómeno se cuantifica mediante el coeficiente volumétrico de transferencia de masa,  $k_L a$ .

Dicho coeficiente combina dos factores clave:

- $k_L$ : el coeficiente de transferencia de masa a través de la interfase gas-líquido
- $a$ : el área de contacto interfacial por unidad de volumen disponible para la transferencia

De este modo,  $k_L a$  representa la capacidad global de un sistema para transferir el oxígeno del aire desde el medio continuo hacia las gotas de líquido. Para su determinación, calcularemos el producto entre los dos factores anteriormente comentados [28] [29].

$$k_L a = k_L \cdot a \quad (2.31)$$

#### Coficiente $k_L$

Para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa en fase líquida se utilizó el modelo de penetración de Higbie [30]. Este modelo se describe mediante la siguiente ecuación:

$$K_L = 2 \cdot \left(\frac{\xi}{\pi t}\right)^{1/2} \quad (2.32)$$

Donde:

- $\xi$  es la difusividad del gas. Por simplificación, ya que no existe un valor específico para el aire, tomamos la difusividad del oxígeno en aire, ya que es el elemento predominante, cuyo valor es  $2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  [31].

- $t$  es el tiempo de renovación de la superficie, es decir, el tiempo promedio que una pequeña proporción de interfase líquida permanece en contacto con la fase continua (gas), antes de ser renovada por el efecto de la turbulencia.

Dicho tiempo de renovación puede ser estimado con la siguiente expresión:

$$t = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad (2.33)$$

Donde:

- $\epsilon$ : es la tasa de disipación de energía cinética turbulenta, que representa la cantidad de energía cinética turbulenta que se transforma en calor por unidad de tiempo y volumen. Se mide en  $m^2/s^3$
- $\nu$ : es la viscosidad turbulenta del líquido, que describe la resistencia al flujo de un fluido en un régimen turbulento, considerando la transferencia de cantidad de movimiento debido a los remolinos o turbulencias. Esencialmente, modela cómo la energía cinética se disipa y se transporta en un flujo turbulento [32].

Todos estos parámetros se obtienen directamente de Fluent, pues varían a lo largo del dominio del volumen representativo.

Con esto, la expresión completa para calcular el coeficiente  $k_L$  es la siguiente:

$$K_L = 2 \cdot \left(\frac{\xi}{\pi}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{1/4} \quad [m/s] \quad (2.34)$$

### Área específica, $a$

El segundo parámetro fundamental que condiciona la eficiencia del intercambio es el área interfacial disponible por unidad de volumen del sistema, conocida como área específica ( $a$ ) y expresada en unidades de  $m^2/m^3$ . Este valor representa la cantidad de superficie de contacto efectiva entre fases disponible para la transferencia de materia en un volumen determinado.

El cálculo del área específica depende del estado en que se encuentra el líquido dentro del volumen representativo considerado. Y es que, en las paredes de los obstáculos existe la posibilidad de que se forme una delgada película líquida adherida a las superficies o el líquido se presente en forma de gotas dispersas. Para aclarar esta situación, se ha llevado a cabo un estudio específico (ver *Anexo IV: Análisis de la Configuración del Líquido: Formación*

de Gotas o Película en el Medio Poroso), con el objetivo de determinar la configuración real del líquido en dichas zonas. Los resultados de dicho análisis confirman que, en las paredes de los anillos se forma una fina capa de líquido que escurre por efecto de la gravedad, y cuyo espesor es de 1.378 mm.

Para el área que ocupa el conjunto de películas que se forman en cada anillo del dominio, crearemos una interfase en Fluent cuya fracción de líquido sea superior a 0.25, condición para que se forme la película de líquido. Como necesitamos el área específica, normalizaremos dicho área obtenida anteriormente al volumen del cubo de fluido.

### Distribuciones aleatorias de $k_L a$

Dado que este parámetro está sujeto a incertidumbres asociadas a la estimación numérica de magnitudes como la disipación de energía turbulenta, la viscosidad efectiva o la densidad del fluido, se aplicó el método estadístico bootstrap para cuantificar dicha incertidumbre [33].

A partir del conjunto de valores simulados de  $k_L a$  en diferentes condiciones de operación (distinto número de Reynolds), se generaron 1000 muestras aleatorias con reemplazo, lo que permitió construir una distribución empírica del valor medio de dicho coeficiente. Este enfoque tiene la ventaja de no requerir suposiciones sobre la distribución subyacente de los datos (como normalidad), y proporciona una estimación directa de la media esperada y su desviación estándar como medida de dispersión.

### 2.3.9. Distribución de tiempos de residencia

El análisis de la distribución de tiempos de residencia (DTR) permite estudiar el comportamiento del fluido dentro del dominio en términos de cuánto tiempo permanecen las partículas en su interior. Esta herramienta es especialmente útil para evaluar la eficiencia del reactor, ya que proporciona información sobre la presencia de zonas de recirculación o estancamientos.

Para calcular los tiempos de residencia en estado estacionario a través de Fluent se utilizaron las llamadas *pathlines* o líneas de corriente: trayectorias de partículas de la mezcla que muestran el tiempo acumulado hasta su salida. Por lo tanto, para cada partícula se tomará el último valor de tiempo de la lista, que corresponde con el tiempo a la salida del sistema.

## Distribuciones aleatorias de DTR

Debido a que la obtención de los tiempos de residencia presenta una cierta incertidumbre, especialmente al conseguirse mediante simulaciones numéricas y métodos de postprocesado basados en el seguimiento de trazadores, se ha optado por aplicar igualmente un análisis estadístico mediante el método *bootstrap*. El código en Python que permite calcular dichas distribuciones aleatorias, tanto para  $k_{La}$  como para la DTR, se encuentra en el *Anexo VI. Distribuciones aleatorias para  $k_{La}$  y DTR*.

# Capítulo 3

## Resultados

Se presentan y analizan a continuación los resultados obtenidos para los modelos cinético y fluidodinámico del sistema de estudio, con el objetivo de analizar su comportamiento y encontrar el punto de operación óptimo para mejorar el rendimiento del reactor.

### 3.1. Modelo cinético

#### 3.1.1. Variación axial de concentraciones

Teniendo en consideración todos los enfoques comentados en la *sección 2.2. Modelo cinético* modelamos en Python el biorreactor de estudio, obteniendo una variación de concentraciones a lo largo de la longitud del reactor que se puede observar en la figura 3.3.

En esta gráfica, la longitud del biorreactor (eje x) representa, en realidad, la altura del mismo, por lo que la parte de la derecha corresponde a la zona superior del biorreactor, mientras que la parte de la izquierda hace referencia a la zona inferior.

Analizaremos lo que ocurre en cada fase por separado.

#### Fase gas

El  $NH_3$  y el  $O_2$  se inyectan desde la parte inferior y difunden hacia la fase líquida, para posteriormente dirigirse hacia el biofilm adherido al medio poroso, donde tienen lugar las reacciones bioquímicas. Por ello, en la fase gas se observa una disminución progresiva de las concentraciones de estas especies desde la entrada izquierda hasta la salida derecha, debido a la transferencia

de masa continua desde la fase gas hacia la fase líquida.

La disminución no es lineal, lo que sugiere que la difusión es rápida al inicio (debido a una mayor diferencia de concentración) y se ralentiza a medida que se aproxima al equilibrio de partición con la fase líquida.

### **Fase líquida**

Tanto el amoníaco como el oxígeno comienzan con concentraciones moderadas debido a la transferencia desde la fase gas, y se mantienen relativamente constantes durante buena parte del recorrido hasta que, hacia el final del reactor, sus concentraciones disminuyen bruscamente por aproximarse al biofilm e intensificarse las reacciones.

El  $NaHCO_3$ , inyectado desde la derecha, muestra un leve perfil decreciente de derecha a izquierda, prueba de la difusión que se produce hacia el biofilm. Por su parte, la concentración de  $NaNO_3$  en la fase líquida aumenta a lo largo del reactor, a medida que se genera en el biofilm y se libera hacia el líquido.

### **Fase Biofilm**

Se aprecia una disminución brusca de  $NH_3$  y  $O_2$  a la entrada de la fase líquida, por la izquierda, al ser consumidos por los microorganismos en el biofilm.

La concentración de  $NaHCO_3$  muestra un decrecimiento leve a lo largo de esta fase. Esto sugiere que se distribuye rápidamente en la fase líquida y no presenta una demanda tan intensa como el  $O_2$  o  $NH_3$ . Y es que, al fin y al cabo, el uso del bicarbonato de sodio tiene como objetivo aportar el sodio para el producto de la reacción, además de regular el pH.

El  $NaNO_3$  aumenta a lo largo del reactor, reflejando la producción acumulada en el biofilm y su liberación continua hacia la fase líquida, aunque alcanza el equilibrio rápidamente.

Por último, la biomasa se mantiene prácticamente constante, lo cual refleja que el crecimiento o disminución del mismo no es considerable en esta reacción química.

Este conjunto de perfiles permite visualizar la dinámica de transferencia de masa entre fases y la evolución de reactivos y productos en un reactor con

biofilm, donde la reacción se limita a este último y depende de la transferencia desde la fase gas y líquida.

### 3.1.2. Análisis de sensibilidad

El comportamiento de un biorreactor está fuertemente influenciado por parámetros operacionales y cinéticos que afectan tanto la eficiencia del proceso como la estabilidad del sistema. Entre los factores más determinantes que serán analizados se encuentran los caudales de entrada de amoníaco, oxígeno y bicarbonato (están relacionados por la estequiometría de la reacción química) y el coeficiente de transferencia de masa, los cuales influyen directamente en la disponibilidad de sustrato, oxígeno disuelto, y por ende, en la productividad biológica del reactor.

El objetivo de este análisis es evaluar cómo pequeñas variaciones en estos parámetros afectan las salidas del modelo cinético (concentraciones axiales). En concreto, tomaremos cuatro casos de los analizados en Fluent (ver sección 3.2.3.): el caso base, el de caudal máximo, el de caudal mínimo y un posible caso óptimo. En la siguiente tabla se recogen los principales parámetros para cada caso.

EBRT [s]	$Q_g$ [ $m^3/s$ ]	Re [-]	$gNH_3/h$	$gO_2/h$	$gNaHCO_3/h$	$k_La$ [1/h]
2	0.35	467	9.12	16.99	4.13	12
5	0.14	187	3.65	6.79	1.65	77
9	0.08	104	2.02	3.78	0.92	125
30	0.02	31	0.61	1.13	0.28	815

Tabla 3.1: Parámetros del análisis de sensibilidad del modelo cinético

Analizamos cada caso por separado, encontrándose las figuras de variación de concentraciones axiales al final de la sección (figuras 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4).

#### Caso mínimo (EBRT = 30 s)

En el escenario con caudales de entrada mínimos (figura 3.1), se observa que las concentraciones de los reactivos se mantienen prácticamente constantes a lo largo del biorreactor, indicando que el suministro es tan bajo que apenas se alcanza una velocidad de reacción apreciable. Como consecuencia, la formación del producto  $NaNO_3$  es prácticamente nula a lo largo de toda la longitud del reactor. La concentración de biomasa en el biofilm también permanece estable, lo que sugiere que el sistema opera muy por debajo de

sus capacidades cinéticas, en un régimen limitado por la baja disponibilidad de sustratos, sin crecimiento ni consumo significativo de biomasa.

### **Caso óptimo (EBRT = 9 s)**

En este escenario óptimo (figura 3.2), los mayores caudales de entrada permiten un perfil más activo de reacción. Se forma producto a lo largo del biorreactor, alcanzando cerca de 1.5 g/L a la salida (recordando que el líquido sale por el extremo izquierdo). Gracias al mayor caudal y mejor transferencia de masa, los reactivos no se agotan al inicio y pueden reaccionar a lo largo de todo el reactor. La biomasa al final es menor que en el caso mínimo, lo que indica que ha sido consumida por actividad metabólica, a diferencia del caso anterior en el que permanecía prácticamente constante.

### **Caso base (EBRT = 5 s)**

El caso base (figura 3.3) presenta un comportamiento similar al caso óptimo, aunque con un tiempo de residencia algo menor. Los reactivos se consumen más rápidamente, y la biomasa también se reduce en mayor medida hacia la salida, lo que refleja una mayor actividad biológica localizada. La producción de  $NaNO_3$  sigue siendo elevada, pero a costa de un mayor desgaste del biofilm.

### **Caso máximo (EBRT = 2 s)**

En este último caso (figura 3.4), los caudales y la tasa de transferencia de masa alcanzan sus valores máximos. Aunque se observa una alta conversión de reactivos, la producción de  $NaNO_3$  no difiere significativamente respecto a los casos intermedios, lo que sugiere una posible limitación por el corto tiempo de residencia. La biomasa al final del reactor es baja, probablemente debido a que la alta actividad y el corto tiempo de contacto no permiten su mantenimiento ni su regeneración a lo largo del biorreactor.

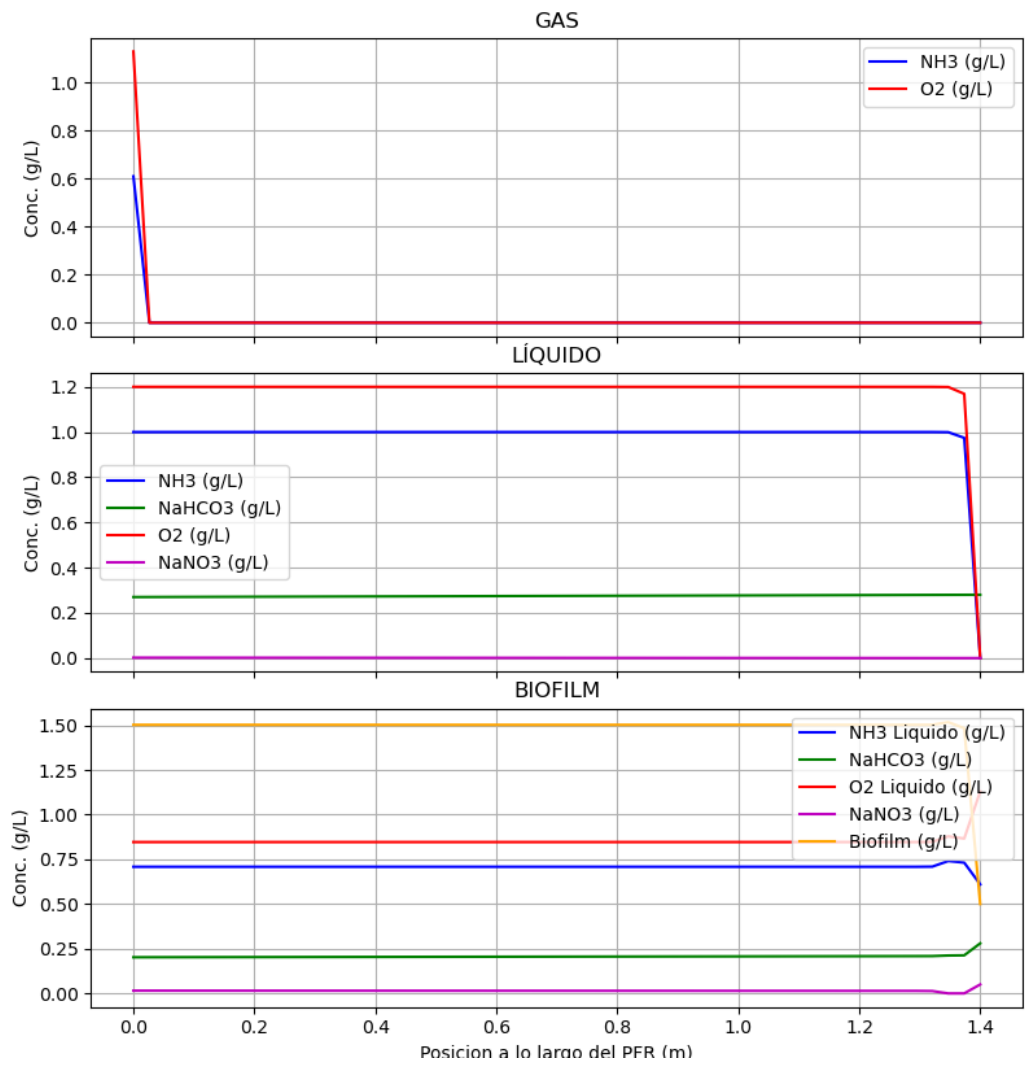


Figura 3.1: Concentraciones axiales en el caso mínimo

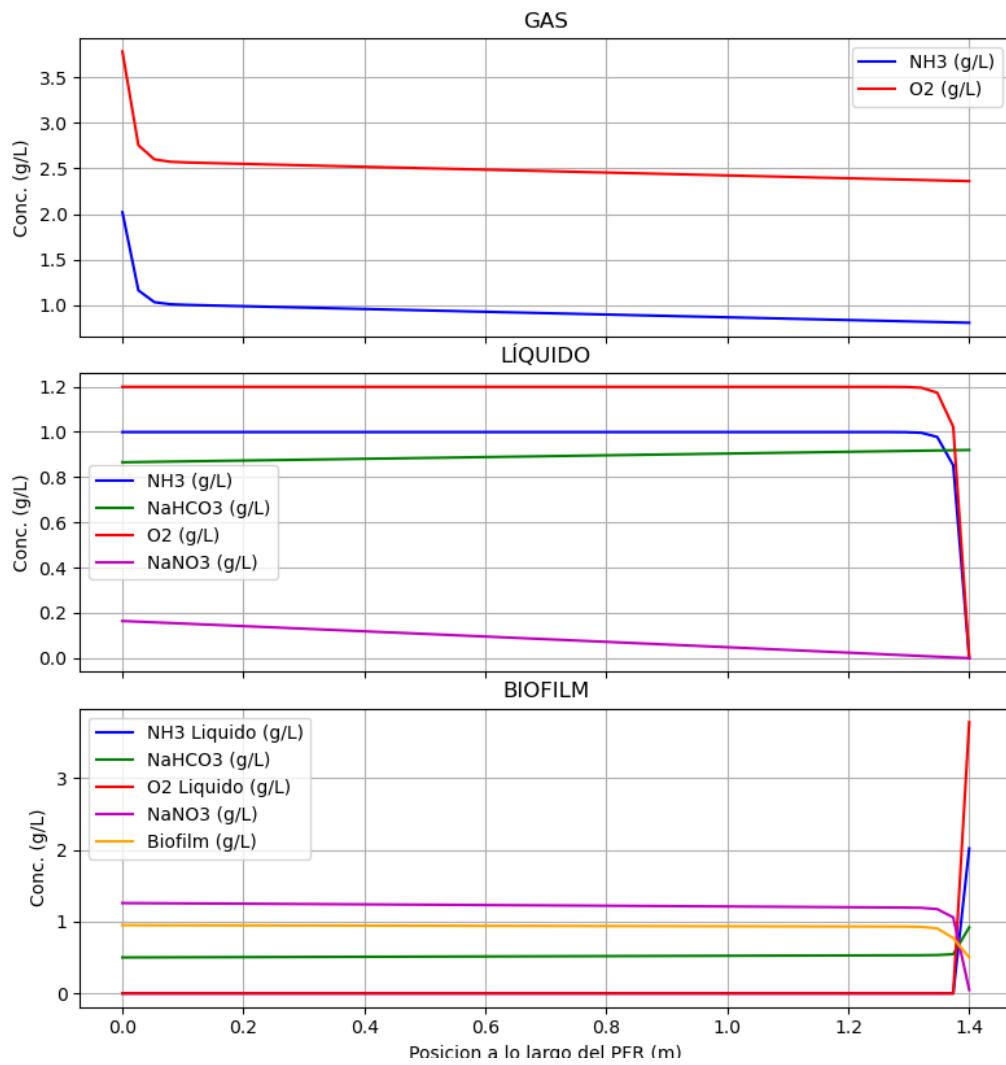


Figura 3.2: Concentraciones axiales en el caso óptimo

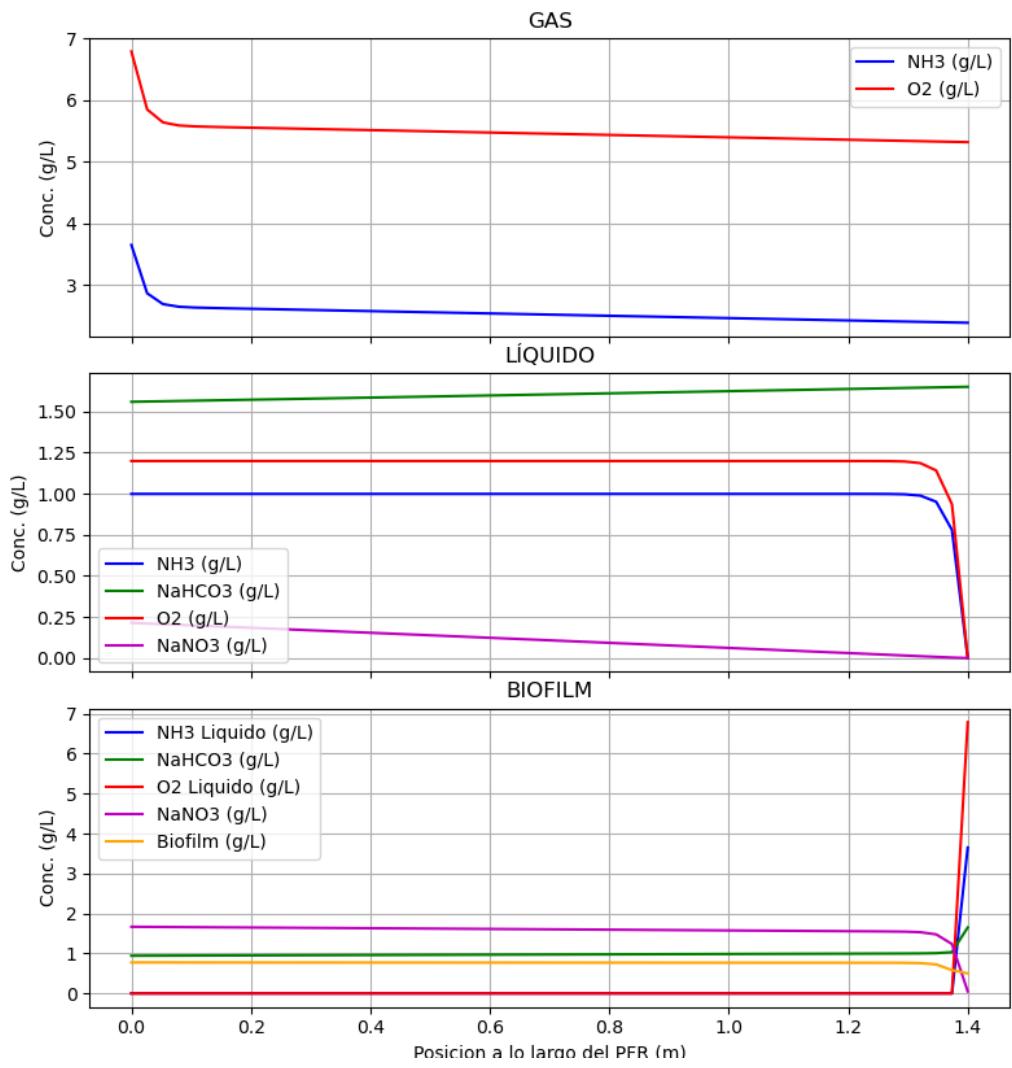


Figura 3.3: Concentraciones axiales en el caso base

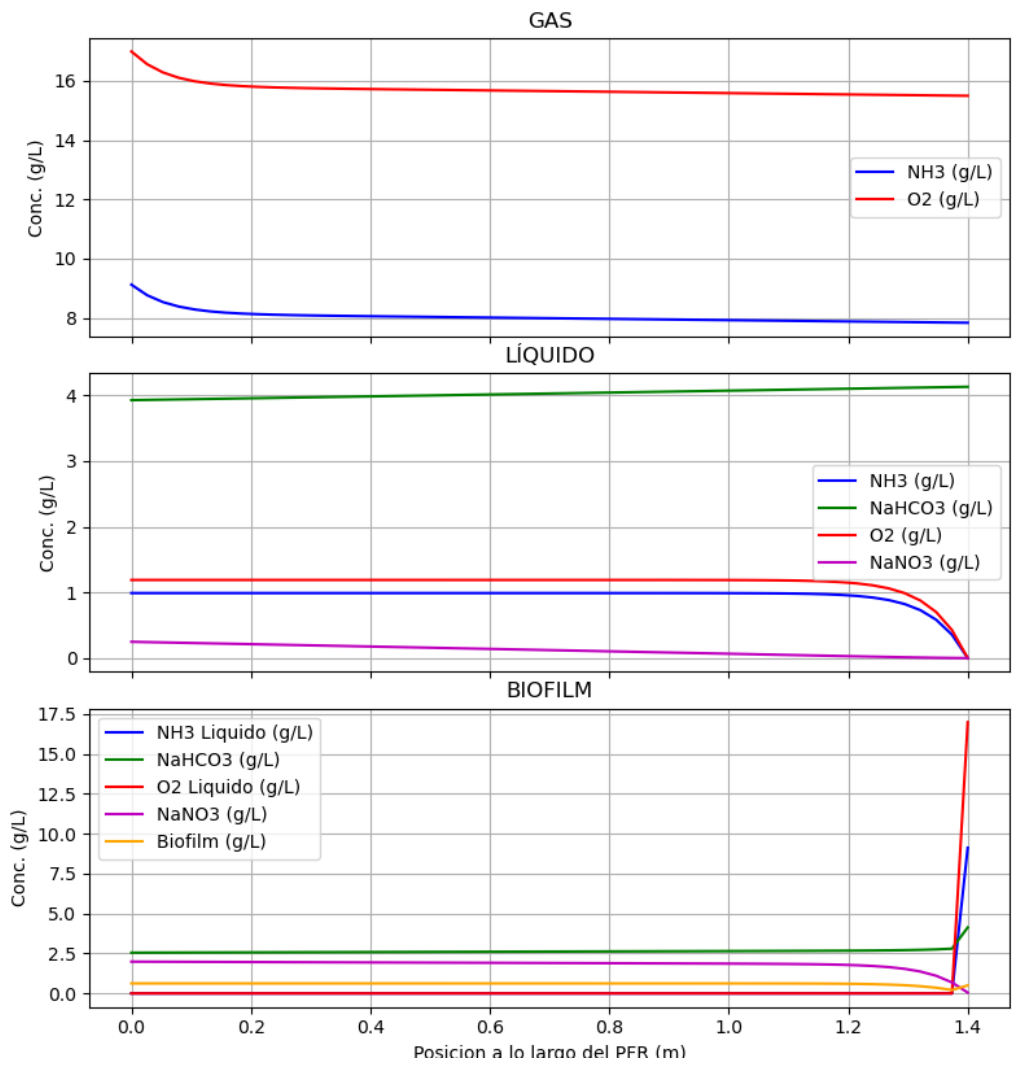


Figura 3.4: Concentraciones axiales en el caso máximo

### 3.1.3. Distribución de tiempos de residencia

La curva DTR se observa en la figura 3.5. El código en Python para obtener dicha curva se recoge en el *Anexo V. Código en Python para DTR y gráfica de  $k_L \cdot a \cdot \tau$  vs  $Re$* .

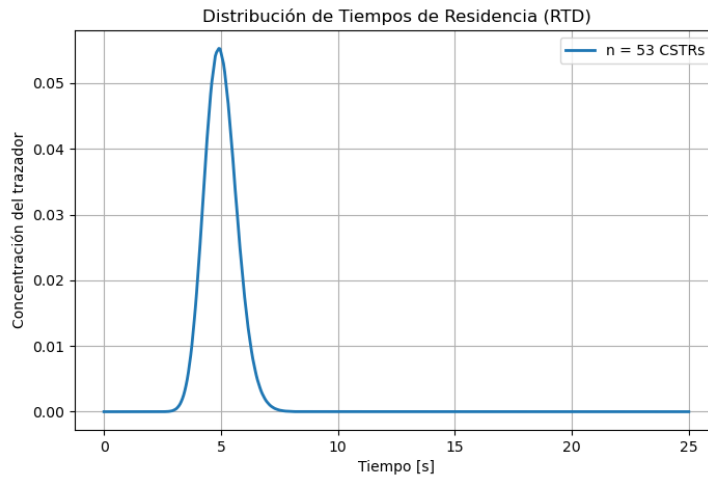


Figura 3.5: DTR con 53 CSTR

Como vemos, con 53 CSTRs la distribución de tiempos de residencia se asemeja a aquella del PFR ideal y no a la del CSTR ideal (figura 3.6), por lo que podemos considerar que es un número adecuado de etapas para representar nuestro biorreactor.

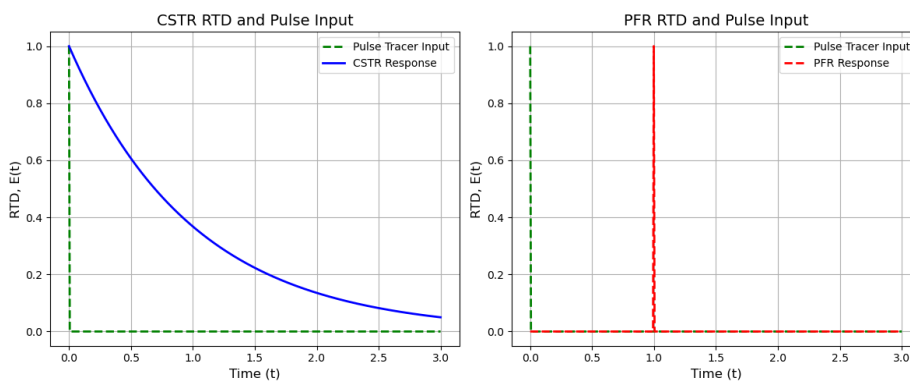


Figura 3.6: Curvas DTR para CSTR y PFR ideales [20]

## 3.2. Modelo fluidodinámico del REV

Presentamos y analizamos los resultados obtenidos a partir de las simulaciones numéricas realizadas sobre el REV del biofiltro con el objetivo de caracterizar el comportamiento del flujo a través del medio poroso simulado.

### 3.2.1. Campo de velocidades

El comportamiento del flujo en un lecho poroso es considerablemente complejo debido a la presencia de obstáculos y porosidades introducidas por los anillos Kaldnes. Esto conlleva que el perfil de velocidades no sea uniforme.

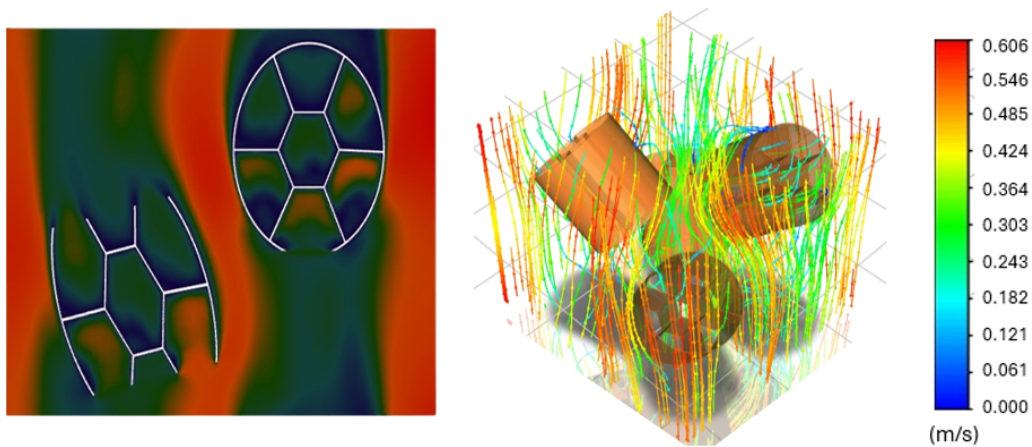


Figura 3.7: Campo de velocidad

En la figura 3.7, a la izquierda, se presenta un corte 2D del lecho donde se visualiza el campo de velocidades mediante un mapa de colores. Esto se complementa con una imagen tridimensional de las líneas de corriente, coloreadas asimismo con los contornos de velocidad.

La distribución heterogénea del flujo es causada por la presencia de los anillos, que actúan como obstáculos en el paso del gas. Las zonas de mayor velocidad (hasta 0.606 m/s) se localizan principalmente en los extremos laterales, donde el flujo encuentra menor resistencia. En contraste, en el interior de los anillos y su estela se desarrollan regiones de baja velocidad ( $< 0.061$  m/s), correspondientes a zonas de estancamiento o recirculación.

Este patrón sugiere que la transferencia de masa hacia las gotas de agua se

ve afectada en las zonas de baja velocidad, pues favorecen un mayor tiempo de contacto al mantenerse el líquido en esas zonas.

### 3.2.2. Campo de presión

Otra propiedad cuyo análisis es interesante es la presión estática. Concretamente, visualizamos en la imagen 3.8 una sección transversal del volumen representativo, correspondiente a un plano YZ. Esto viene complementado con una escala de colores para visualizar las zonas de máxima y mínima presión relativa.

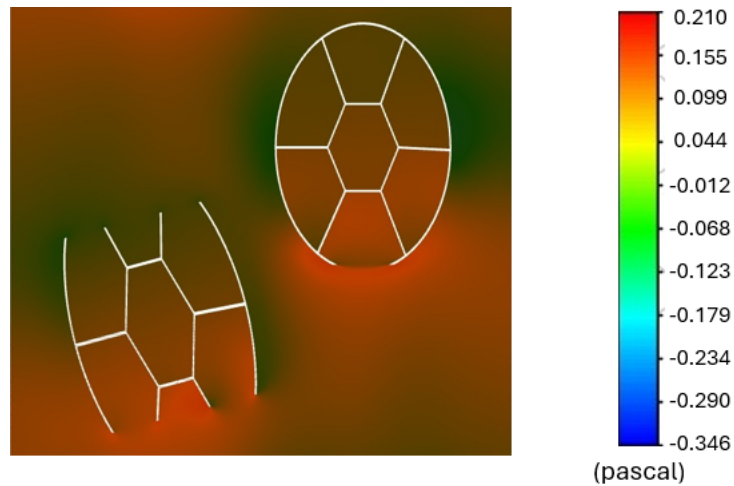


Figura 3.8: Campo de presiones

Se observa un patrón característico de la interacción entre el flujo gaseoso y los anillos, que actúan como elementos de obstrucción. En las regiones aguas arriba de los anillos (zona de impacto), la presión aumenta ligeramente debido a la acumulación local del fluido, lo que se traduce en las zonas rojizas visibles en el frente de cada anillo. Por el contrario, en las regiones aguas abajo, se forman zonas de baja presión asociadas a fenómenos de estela o recirculación, representadas por tonos más oscuros (verdes y azules).

Este gradiente de presión influye, además de en la distribución del gas, en la interacción con la fase líquida y, por lo tanto, en la eficiencia de la transferencia de masa. Esto es debido a que zonas con un mayor gradiente inducen mayor velocidad local y turbulencia, lo cual provoca una renovación más rápida de la interfase gas-líquido, favoreciendo el proceso de transferencia de masa. Esto ocurre alrededor de los anillos.

### 3.2.3. ( $k_L \cdot a \cdot \tau$ ) vs Reynolds

Una de las formas más efectivas de evaluar el rendimiento global de un sistema de mezcla es a través del análisis conjunto del coeficiente de transferencia de masa volumétrico  $k_L a$  y del tiempo de residencia medio  $\tau$ . El producto  $k_L \cdot a \cdot \tau$  puede interpretarse como un parámetro adimensional que cuantifica la eficiencia global de transferencia de masa durante la permanencia del fluido en el sistema.

En este apartado se representa gráficamente este producto frente al número de Reynolds para el gas, el cual actúa como parámetro de control del régimen de flujo (indica si el flujo es laminar o turbulento), y se calcula con la expresión 3.1.

$$Re = \frac{\rho_G \cdot v_G \cdot L}{\mu_G} = \frac{1,2 \cdot v \cdot 0,01}{1,8 \cdot 10^{-5}} = \frac{2000 \cdot v}{3} \quad (3.1)$$

Donde:

- $\rho_G$  es la densidad del aire, en  $kg/m^3$
- $v_G$  es la velocidad del aire, en m/s
- $L$  es la longitud característica, que consideramos que es la altura del anillo, en m
- $\mu_G$  es la viscosidad del aire, en  $kg/ms$

El objetivo es identificar un punto óptimo de funcionamiento, definido como aquel en el que el incremento de la intensidad de agitación (y, por tanto, del consumo energético) deja de producir una mejora proporcional en la eficiencia de transferencia. Dicho punto suele coincidir con una inflexión en la curva, a partir del cual se observan rendimientos marginales decrecientes.

Este análisis permite establecer un criterio técnico para seleccionar las condiciones de operación, balanceando adecuadamente la eficiencia del proceso y el consumo energético.

#### $k_L \cdot a$ vs Re

Al aumentar el Reynolds del gas, este se desplaza a mayor velocidad y, por lo tanto, hay una mayor turbulencia. Esto influye directamente en la tasa de disipación de energía turbulenta,  $\epsilon$ , provocando un incremento en el coeficiente  $k_L$ , tal y como observamos en la gráfica 3.9.

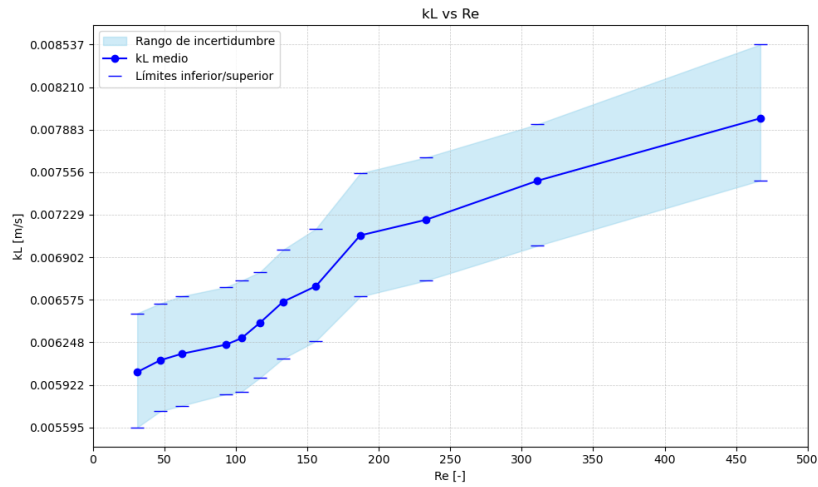


Figura 3.9:  $k_L$  vs Re

Al multiplicar dicho coeficiente con el área específica de intercambio, observamos que la tendencia es descendente con el número de Reynolds, lo cual no es coherente, pues el área de intercambio también debería aumentar, dando lugar a una gráfica ascendente con el número de Reynolds.

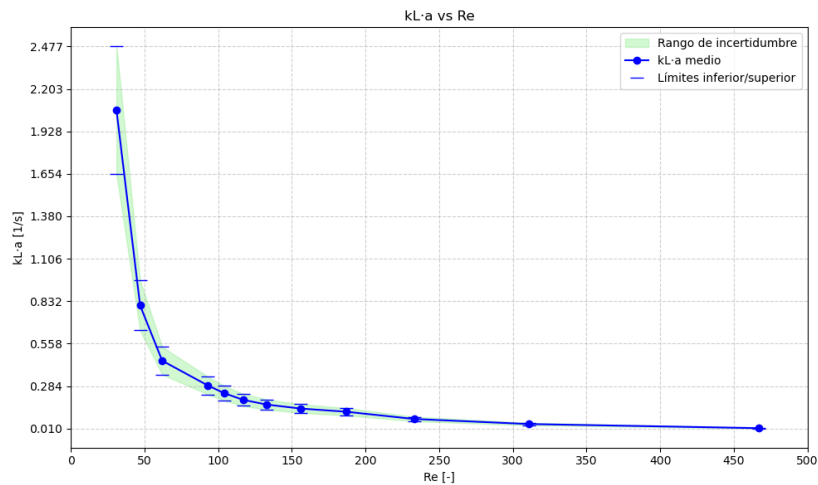


Figura 3.10:  $k_L \cdot a$  vs Re

Lo que ocurre es que no se tiene en cuenta todo el área de intercambio, sino únicamente la correspondiente a la película que se forma sobre el anillo, la cual es cada vez menor conforme aumenta la turbulencia, pues el gas arranca dicha película. Igualmente, esto no implica que haya menos líquido,

sino que dicho líquido pasa a estar en forma de gotas dispersas en el dominio gaseoso. Como trabajo futuro, se debería realizar el cálculo del área específica teniendo en cuenta la ruptura de la película y la consecuente formación de gotas dispersas.

### $\tau$ vs $Re$

En este caso, no tenemos un valor concreto del tiempo de residencia, sino una distribución. Para el caso base, dicha DTR se observa en la figura 3.11. De esta DTR obtenemos el tiempo medio y el rango de incertidumbre como  $\pm 2\sigma$ , donde  $\sigma$  es la desviación estándar.

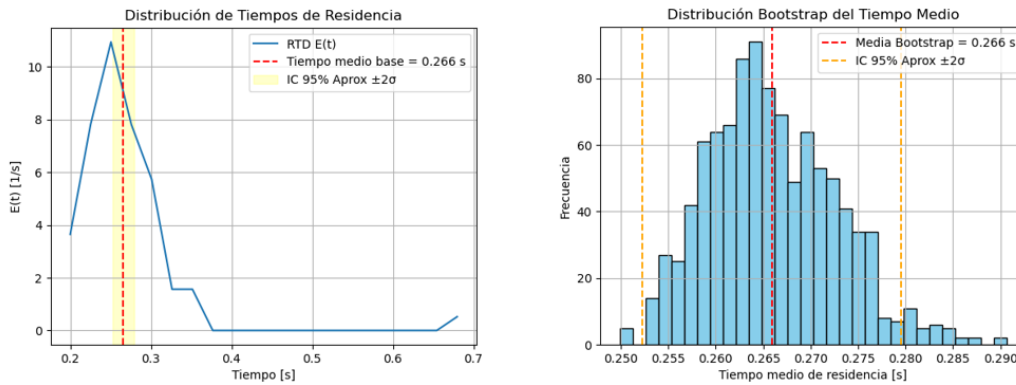


Figura 3.11: Distribución de tiempos de residencia

Una vez obtenidos todos los tiempos medios con sus rangos de incertidumbre para cada régimen de flujo, construimos la gráfica de la figura 3.12. Es conveniente destacar que el tiempo que se obtiene en la figura 3.11 es únicamente en el REV. Para escalar al biorreactor entero, calculamos cuántos cubos representativos se deberían colocar para igualar la altura del biorreactor, ya que es esa la dimensión que condiciona el tiempo de residencia.

$$n^{\circ} REV_s = \frac{h_{\text{biorreactor}}}{h_{REV}} = \frac{1,4}{0,026} = 53,84 \text{ cubos de REV} \quad (3.2)$$

En este caso, la tendencia es similar, pues conforme aumenta la velocidad del gas, este necesita menos tiempo para salir del biorreactor, por lo que el tiempo de residencia disminuye.

Es notable la diferencia que hemos podido observar entre la DTR con el modelo cinético y con el modelo fluidodinámico (5 segundos de tiempo de residencia frente a 15). Esto ocurre porque en el segundo modelo se tiene en

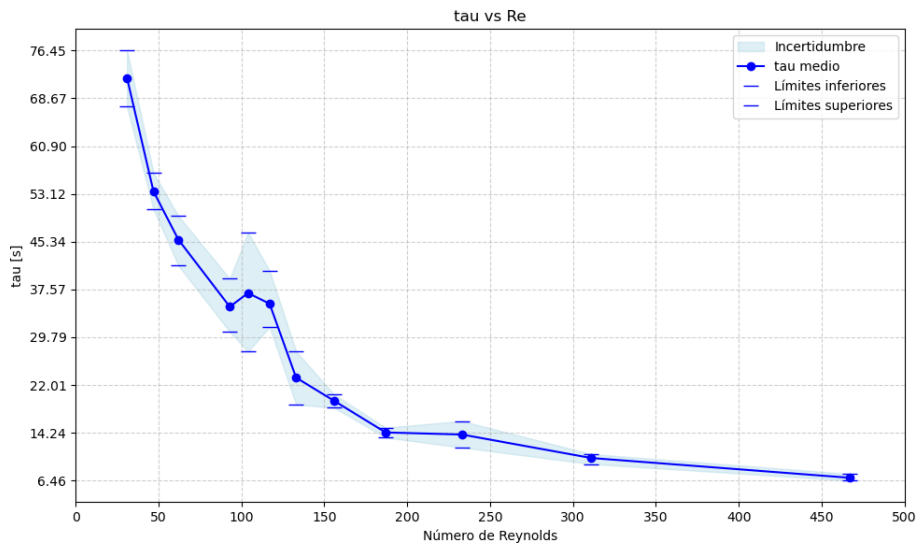


Figura 3.12:  $\tau$  vs Re

cuenta tanto la presencia de líquido como la geometría de los anillos Kaldnes, que dan lugar a recirculaciones, provocando que el gas se frene.

### $k_L a \cdot \tau$ vs Re

Combinando las dos gráficas 3.10 y 3.12, obtenemos el comportamiento observado en la figura 3.13.

El análisis de las gráficas muestra que tanto el coeficiente volumétrico de transferencia como el tiempo de residencia disminuyen con el aumento del número de Reynolds, por lo que no se encuentra un punto de inflexión al que poder asociar la condición óptima de operación.

Igualmente, basándonos en la literatura y estudios previos, podemos asegurar que operar a Reynolds elevados es ineficiente debido al reducido tiempo de residencia que se consigue, evitando una buena transferencia gas-líquido. Por otro lado, operar a Reynolds bajos también es contraproducente, pues conseguimos valores mínimos de  $k_L$ , limitando la transferencia de masa. Además, viendo las gráficas, en regímenes muy laminares aparece mucha incertidumbre de medida, lo cual conduce a resultados poco fiables [34].

Por lo tanto, en una primera conclusión, y a falta de resultados del área específica de intercambio, podemos considerar que el punto óptimo de ope-

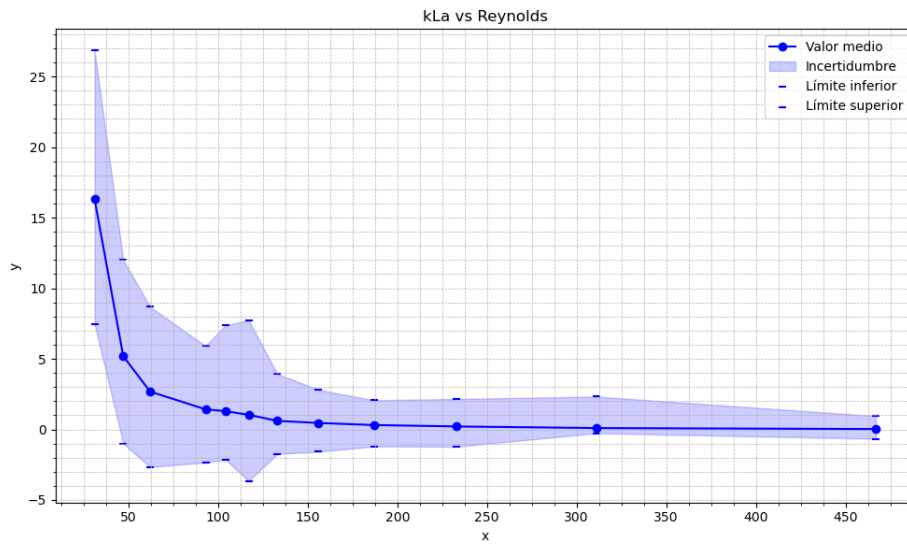


Figura 3.13:  $k_L a \cdot \tau$  vs Re

ración se encontrará a Reynolds moderados.

## Capítulo 4

# Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo se desarrolló un modelo cinético y fluidodinámico integral para describir con precisión el comportamiento de la reacción química en el interior del reactor. El modelo cinético incorpora las principales rutas de reacción, considerando tanto reacciones primarias como secundarias, así como la influencia de parámetros termodinámicos y de transferencia de masa. Por su parte, el modelo fluidodinámico desarrollado con técnicas CFD permitió simular con detalle la distribución de velocidades, presiones y fases a lo largo del volumen representativo creado a tal efecto. La integración de ambos enfoques proporciona una herramienta robusta para la predicción del rendimiento del reactor bajo distintas condiciones de operación.

Dicha herramienta demuestra una alta versatilidad, haciéndolo aplicable a distintas condiciones de operación (distintos caudales, diferencias de presión, fracciones volumétricas, e incluso compuestos químicos). Esta flexibilidad amplía significativamente el campo de aplicación del modelo, permitiendo su utilización tanto en estudios de laboratorio como en procesos industriales de mayor escala.

Concretamente, el uso de este modelo en el contexto de las biorrefinerías resulta altamente relevante, ya que permite optimizar procesos clave en la conversión de biomasa en productos de valor añadido, tales como biocombustibles, bioquímicos y materiales renovables. Al comprender de manera detallada las dinámicas de reacción y flujo en el reactor, es posible maximizar la eficiencia, reducir el consumo energético y minimizar la formación de subproductos no deseados. Esto se traduce en una operación más sostenible y económicamente viable, aspectos fundamentales para la implementación a escala industrial de las biorrefinerías.

Por último, una de las perspectivas más prometedoras identificadas en este estudio es la posibilidad de mejorar el rendimiento del proceso mediante modificaciones en la geometría del reactor. El análisis fluidodinámico evidencia que ciertas zonas del reactor presentan recirculaciones o zonas muertas que podrían limitar la conversión total. Por lo tanto, el rediseño del sistema –como la incorporación de baffles, variaciones en el diámetro o longitud del reactor, o incluso la implementación de configuraciones modulares– podría conducir a una distribución más homogénea del flujo y, en consecuencia, a un aumento en la eficiencia de conversión. Futuras investigaciones podrían centrarse en la optimización geométrica mediante simulaciones CFD avanzadas y validaciones experimentales.

# Bibliografía

- [1] J. Köninger et al. “Manure management and soil biodiversity: Towards more sustainable food systems in the EU”. En: *Agricultural Systems* (2021). DOI: 10.1016/j.agry.2021.103251. URL: <https://doi.org/10.1016/j.agry.2021.103251>.
- [2] Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. *Sistema Español de Inventario de Emisiones: Informe interactivo*. 2025. URL: <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/sistema-espanol-de-inventario-sei-/>.
- [3] J. Lelieveld et al. “Loss of life expectancy from air pollution compared to other risk factors: A worldwide perspective”. En: *Cardiovascular Research* 116.11 (2020), págs. 1910-1917. DOI: 10.1093/cvr/cvaa025.
- [4] Z. Guo et al. “Does animal manure application improve soil aggregation. Insights from nine long-term fertilization experiments”. En: *The Science of the Total Environment* 660 (2019), págs. 1029-1037. DOI: 10.1016/J.SCITOTENV.2019.01.051.
- [5] E. Giannakis et al. “Costs and benefits of agricultural ammonia emission abatement options for compliance with European air quality regulations”. En: *Environmental Sciences Europe* 31.1 (2019). DOI: 10.1186/s12302-019-0275-0.
- [6] N.-J. Kim et al. “Removal of a high load of ammonia gas by a marine bacterium, *Vibrio alginolyticus*”. En: *Journal of Bioscience and Bioengineering* 90.4 (2000), págs. 410-415.
- [7] S. P. P. Ottengraf y A. H. C. van den Oever. “Kinetics of organic compound removal from waste gases with a biological filter”. En: *Biotechnology and Bioengineering* 25.12 (1983), págs. 3089-3102. DOI: 10.1002/bit.260251222.

- [8] Basil C. Baltzis, S. M. Wojdyla y S. M. Zarook. “Modeling biofiltration of VOC mixtures under steady-state conditions”. En: *Journal of Environmental Engineering* 123.6 (1997), págs. 599-605. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9372(1997)123:6(599).
- [9] S. M. Zarook y A. A. Shaikh. “Analysis and comparison of biofilter models”. En: *Chemical Engineering Journal* 65.1 (1997), págs. 55-61. DOI: 10.1016/S1385-8947(96)03101-4.
- [10] Md. Amanullah, S. Farooq y S. Viswanathan. “Modeling and simulation of a biofilter”. En: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 38 (1999), págs. 2765-2774.
- [11] Marc A. Deshusses, Geoffrey Hamer e Irving J. Dunn. “Behavior of biofilters for waste air biotreatment. 1. Dynamic model development”. En: *Environmental Science & Technology* 29.4 (abr. de 1995), págs. 1048-1058. DOI: 10.1021/es00004a027.
- [12] S. M. Zarook, A. A. Shaikh y Z. Ansar. “Development, experimental validation and dynamic analysis of a general transient biofilter model”. En: *Chemical Engineering Science* 52.5 (1997), págs. 759-773. DOI: 10.1016/S0009-2509(96)00428-9.
- [13] L. Prades. “CFD modeling of a fixed-bed biofilm reactor coupling hydrodynamics and biokinetics”. En: *Chemical Engineering Journal* 313 (2017), págs. 1205-1215. DOI: 10.1016/j.cej.2016.12.107.
- [14] Y. Le Moullec et al. “Simulación CFD de la hidrodinámica y reacciones en un reactor de canal de lodos activados de tratamiento de aguas residuales”. En: *Quemical Engineering Science* 65.1 (ene. de 2010), págs. 492-498. DOI: 10.1016/j.ces.2009.03.021.
- [15] Yulong He, Ting Zhang, Wei Wang et al. “Lattice Boltzmann methods for single-phase and solid-liquid phase-change heat transfer in porous media: A review”. En: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 127 (2019), págs. 908-933. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.10.112.
- [16] Chunrui Wu et al. “Random pore structure and REV scale flow analysis of engine particulate filter based on LBM”. En: *Open Physics* 18.1 (2020), págs. 881-896. DOI: 10.1515/phys-2020-0208.
- [17] Pauline M. Doran. *Bioprocess Engineering Principles*. 2nd. Amsterdam, Boston, Heidelberg, London, New York, Oxford, Paris, San Diego, San Francisco, Singapore, Sydney, Tokyo: Academic Press, 2013. ISBN: 978-0-12-220851-5.

- [18] L.R. López et al. “Modeling an aerobic biotrickling filter for biogas desulfurization through a multi-step oxidation mechanism”. En: *Chemical Engineering Journal* 294 (2016), págs. 447-457. DOI: 10.1016/j.cej.2016.03.013.
- [19] Carreño et al. “Comparative Analysis of Packing Materials in Biotrickling Filters: Investigating Gas-Liquid-Packing Interactions via Gas-Phase Residence Time Distributions”. En: (2025). Forthcoming article.
- [20] Chemenggc. *C Curve, E Curve and F Curve from Pulse or Step Input Tracer in Non Ideal Reactor*. Accessed: 2025-05-07. 2024. URL: <https://chemenggc.com/c-curve-e-curve-and-f-curve-from-pulse-or-step-input-tracer-in-non-ideal-reactor/>.
- [21] Chemenggc. *Residence time distribution in CSTR and PFR*. Accessed: 2025-05-07. 2024. URL: <https://chemenggc.com/residence-time-distribution-in-cstr-and-pfr/>.
- [22] O.-I. Lekang y H. Kleppe. “Efficiency of nitrification in trickling filters using different filter media”. En: (1999). DOI: 10.1016/S0144-8609(99)00032-1.
- [23] Jiangxi Fuxin Environmental Technology Co., Ltd. *K1 K2 K3 Mbbf Bioreactor Mbbf Bio Filter Packing Media*. 2024. URL: [https://es.made-in-china.com/co\\_jxfxsino/product\\_K1-K2-K3-Mbbf-Bioreactor-Mbbf-Bio-Filter-Packing-Media\\_uoyyohnhuy.html](https://es.made-in-china.com/co_jxfxsino/product_K1-K2-K3-Mbbf-Bioreactor-Mbbf-Bio-Filter-Packing-Media_uoyyohnhuy.html).
- [24] Mundo Koi. *Kaldnes K1 Media*. n.d. URL: <https://www.mundokoi.es/producto/kaldnes-k1-media/>.
- [25] Zheng et al. “Nitrogen removal via simultaneous partial nitrification, anammox and denitrification (SNAD) process under high DO condition”. En: (2016). Forthcoming or incomplete reference.
- [26] V. Iyer et al. “ANSYS Mosaic Poly-Hexcore Mesh for High-Lift Aircraft Configuration”. En: <https://www.researchgate.net/publication/335789150> (2019). URL: [https://www.researchgate.net/publication/335789150\\_ANSYS\\_MOSAIC\\_POLY-HEXCORE\\_MESH\\_FOR\\_HIGH-LIFT\\_AIRCRAFT\\_CONFIGURATION](https://www.researchgate.net/publication/335789150_ANSYS_MOSAIC_POLY-HEXCORE_MESH_FOR_HIGH-LIFT_AIRCRAFT_CONFIGURATION).
- [27] M. Manninen, V. Taivassalo y S. Kallio. *On the Mixture Model for Multiphase Flow*. Vol. 288. VTT Publications. Espoo, Finland: Technical Research Centre of Finland, 1996.
- [28] Ansys, Inc. *Ansys Fluent Theory Guide*. 2025 R1. Ansys, Inc. Canonsburg, PA, ene. de 2025.

- [29] Ansys, Inc. *Ansys Fluent Tutorial Guide*. 2025 R1. Ansys, Inc. Canonsburg, PA, ene. de 2025.
- [30] K. Svay et al. “Computational fluid dynamics analysis of mixing and gas–liquid mass transfer in wave bag bioreactor”. En: *Biotechnology Progress* (2020). Advance online publication. DOI: 10.1002/btpr.3049. URL: <https://doi.org/10.1002/btpr.3049>.
- [31] Wei Xing et al. “Solubilidad del oxígeno, coeficiente de difusión y viscosidad de la solución”. En: *Métodos de electrodos rotatorios y electrocatalizadores de reducción de oxígeno*. Elsevier, 2014, págs. 1-31. DOI: 10.1016/B978-0-444-63278-4.00001-X. URL: <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63278-4.00001-X>.
- [32] OpenStax. *14.7: Viscosidad y turbulencia*. OpenStax, Rice University. 2022. URL: <https://openstax.org/books/f%C3%ADsica-universitaria-volumen-1/pages/14-7-viscosidad-y-turbulencia>.
- [33] Minitab Support. *¿Qué es el bootstrapping?* 2024. URL: <https://support.minitab.com/es-mx/minitab/help-and-how-to/probability-distributions-random-data-and-resampling-analyses/supporting-topics/resampling-analyses/what-is-bootstrapping/>.
- [34] A. Jiménez-González et al. “Evaluación de coeficientes volumétricos de transferencia de hidrocarburos poliaromáticos y oxígeno en sistemas multifásicos (líquido–líquido y líquido–líquido–gas): efecto de la carga volumétrica de solventes biocompatibles”. En: *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 14.3 (2015), págs. 723-734. URL: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=62043088013>.
- [35] *Cinética de Michaelis-Menten*. quimica.es. 2024. URL: [https://www.quimica.es/enciclopedia/Cin%C3%A9tica\\_de\\_Michaelis-Menten.html](https://www.quimica.es/enciclopedia/Cin%C3%A9tica_de_Michaelis-Menten.html).
- [36] *Ley de Henry*. quimica.es. 2025. URL: [https://www.quimica.es/enciclopedia/Ley\\_de\\_Henry.html](https://www.quimica.es/enciclopedia/Ley_de_Henry.html).
- [37] *Ley de Henry: Solubilidad de Gases en Líquidos*. UAPA - CUAED UNAM. 2025. URL: [https://repositorio-uapa.cuaed.unam.mx/repositorio/moodle/pluginfile.php/2886/mod\\_resource/content/1/UAPA-Ley-Solubilidad-Henry/index.html](https://repositorio-uapa.cuaed.unam.mx/repositorio/moodle/pluginfile.php/2886/mod_resource/content/1/UAPA-Ley-Solubilidad-Henry/index.html).
- [38] *Ley de Fick*. StudySmarter. 2025. URL: <https://www.studysmarter.es/resumenes/ingenieria/ingenieria-quimica/ley-de-fick/>.
- [39] Cesar R. Torres et al. *BioSTEAM: Biorefinery Simulation and Techno-Economic Analysis Modules*. 2025. URL: <https://biosteam.readthedocs.io/en/latest/API/index.html>.

- [40] R. Byron Bird, Warren E. Stewart y Edwin N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. 2.<sup>a</sup> ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2007. ISBN: 978-0-470-11539-8.