



Institución Universitaria

**Modelo Semifísico de Base Fenomenológica de la
Transferencia de Oxígeno para el Tratamiento de
Aguas Residuales en una Planta Piloto Aireada por
Difusión**

Maribel Ruiz Botero

Instituto Tecnológico Metropolitano
Facultad de Ingenierías
Medellín, Colombia
2019

Modelo Semifísico de Base Fenomenológica de la Transferencia de Oxígeno para el Tratamiento de Aguas Residuales en una Planta Piloto Aireada por Difusión

Maribel Ruiz Botero

Tesis de grado presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Automatización y Control Industrial

Directores:

Ph.D. Manuel Alejandro Ospina Alarcón

Ph.D. José Fernando García Tirado

Línea de Investigación:

Sistemas de Control y Robótica

Grupo de Investigación:

Automática, Electrónica y Ciencias Computacionales

Instituto Tecnológico Metropolitano

Facultad de Ingenierías

Medellín, Colombia

2019

A Dios y mi familia...

Agradecimientos

Agradezco a la Facultad de ciencias económicas y administrativas, en especial al Grupo de Calidad, Metrología y Producción, por la financiación de los instrumentos de medición de oxígeno, válvula y software (Computador, labview y MatLab). Al proyecto P14104 “Modelado y control no lineal de dinámica de fluidos a partir del desarrollo de un módulo experimental” por la financiación de la construcción de la planta piloto, y sensores de nivel y temperatura.

A Colciencias por brindarme la oportunidad de contar con el programa de jóvenes investigadores e innovadores durante un año de la maestría y a sapiencia y el Municipio de Medellín por la beca del programa “extendiendo fronteras educativas”.

A los integrantes del semillero de Automática por escucharme y hacerme correcciones cuando era necesario, agradezco todas las sugerencias realizadas porque ellas influyeron positivamente en el desarrollo de mi tesis de maestría.

A mi director Manuel Alejandro Ospina Alarcón y mi co-director José Fernando García Tirado por la oportunidad que me brindaron de aprender, por sus asesorías y su apoyo constante en el tiempo de desarrollo y finalización de la tesis de maestría. Al profesor Hernán Álvarez de la Universidad Nacional de Colombia, por su disposición para asesorarme cuando lo necesitaba y su confianza para recomendarme en este trabajo. Al profesor Jhon Alexander Isaza Hurtado por su colaboración y sus comentarios sobre mi trabajo.

A mis compañeras del semillero de automática Laura y Estefania, por acompañarme en todo este proceso de aprendizaje, una de las mejores cosas que me deja la maestría es haberlas conocido. A mi compañera del pregrado Keidy por toda su colaboración y por compartir sus hallazgos conmigo.

Y finalmente, a las personas más valiosas e importantes en mi vida, mi familia y mi pareja, agradezco con todo mi corazón todo el apoyo que me han brindado tanto económico como moral, sin ustedes el desarrollo de esta tesis no hubiera sido posible. Gracias por ser el motivo para levantarme cada día y hacer las cosas que hago con amor.

Resumen

La aireación en una planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) es un proceso de alto consumo energético y de gran importancia para transferencia de masa, ya que de este depende la calidad del lodo activado (biomasa bacteriana concentrada), encargado de remover los contaminantes orgánicos y los sólidos suspendidos en el agua, por lo tanto de la calidad de dicho lodo depende la eficiencia en la remoción de contaminantes y las condiciones del agua al realizar su disposición final. Dada la importancia de este proceso, la transferencia de oxígeno en sistemas tanques aireados ha sido ampliamente estudiada a través de los años, estudios que en su mayoría se basan en la propuesta de nuevas correlaciones empíricas que permiten la determinación del coeficiente de transferencia de masa, el área interfacial específica de transferencia de masa y la retención de gas, asociados a la dinámica de la concentración de oxígeno.

En este trabajo se desarrolló un modelo semifísico de base fenomenológica (MSBF) para una planta piloto aireada mediante una metodología formal de modelado y se propuso una ecuación constitutiva de base teórica para el coeficiente de transferencia de masa, a partir de la teoría de la penetración de Higbie y el diámetro promedio de la burbuja. Finalmente, se realizó una comparación entre la solución numérica del modelo matemático al emplear diferentes correlaciones empíricas y teóricas para el coeficiente de transferencia de masa, con respecto a los datos experimentales obtenidos de la planta piloto. Se evidenció que al emplear la ecuación constitutiva propuesta para determinar el coeficiente volumétrico de masa, los resultados del MSBF tienen un porcentaje de error menor al 10 %, con respecto a los datos experimentales. En los casos en los que se emplearon aproximaciones empíricas, el porcentaje de error con respecto a los datos experimentales se encuentra entre el 30 y 32 %.

Palabras clave: MSBF, PTAR, principios de conservación, simulación, coeficiente de transferencia de oxígeno, procesos de aireación, transferencia de oxígeno.

Abstract

In wastewater treatment plants (WWTP) the activated sludge quality depends on aeration, a process of high energy consumption and paramount importance for mass transfer. Activated sludge removes organic pollutants and suspended solids; therefore a higher activated sludge quality involves a greater efficiency for removing pollutants and water conditions for final disposal. Given the importance of aeration, oxygen transfer in aerated tank systems has been widely studied over the years and these studies are mostly based on new empirical correlation proposals to determine the mass transfer coefficient, the mass transfer specific interfacial area and gas retention, all of them associated with the dynamics of oxygen concentration.

In this study, a phenomenological-based semi-physical model (PSBM) for an aerated pilot plant using a formal modeling methodology was developed and a constitutive equation for the mass transfer coefficient based on Higbie penetration theory and bubble mean diameter was proposed. Finally, a comparison between pilot plant experimental data and the mathematical models numerical solution employing different correlations (empirical and theoretical) for mass transfer coefficient was performed. Error percentage was less than 10 % when the proposed theoretical correlations were used. In the cases in which empirical approximations were used, the percentage of error with respect to the experimental data is between 30 and 32 %.

Keywords: PSBM, WWTP, conservation principles, simulation, oxygen transfer coefficient, aeration processes, oxygen transfer.

Contenido

Resumen	v
Lista de Figuras	ix
Lista de Tablas	x
Lista de Símbolos y Abreviaturas	xi
1. Introducción	1
2. Marco Teórico y Estado del Arte	4
2.1. Modelos matemáticos de procesos químicos y bioquímicos	4
2.2. Estructura de un modelo semifísico de base fenomenológica	6
2.2.1. Ecuaciones de balance de masa, energía y cantidad de movimiento	6
2.2.2. Ecuaciones constitutivas	7
2.3. Transferencia de oxígeno en sistemas gas- líquido	8
2.3.1. Balance de oxígeno	8
2.3.2. Coeficiente de transferencia de masa	11
2.3.3. Retención de gas	19
2.3.4. Diámetro de burbuja	20
2.4. Planteamiento del problema	21
2.5. Hipótesis	22
2.6. Objetivos de la tesis	22
2.6.1. Objetivo general	22
2.6.2. Objetivos específicos	22
2.7. Principal contribución	23
3. Metodología	24
4. Resultados y Discusión	26
4.1. Construcción, descripción verbal de la planta piloto y diagrama de flujo de proceso	26
4.1.1. Descripción verbal	26
4.1.2. Montaje experimental	26
4.1.3. Diseño del difusor de aire	28

4.2.	Nivel de Detalle, Qué Preguntas Contestará el Modelo?, Hipótesis de Modelado . . .	29
4.2.1.	Nivel del detalle	29
4.2.2.	¿Qué pregunta contestará el modelo?	29
4.2.3.	Hipótesis de Modelado	29
4.3.	Sistemas de proceso y Diagrama de Flujo en Bloques de los sistemas de proceso . .	31
4.4.	Aplicación del principio de conservación a cada uno de los sistemas de proceso . .	32
4.4.1.	S_{deP_I} : fluido de proceso en el intercambiador de calor	32
4.4.2.	$S_{deP_{II}}$: volumen de líquido contenido en el tanque aireado	34
4.4.3.	$S_{deP_{III}}$: tanque auxiliar	36
4.5.	Ecuaciones dinámicas de balance del modelo	38
4.6.	Clasificación en parámetros, constantes y variables	38
4.7.	Ecuaciones constitutivas	38
4.7.1.	Coefficiente de transferencia de masa	39
4.7.2.	Diámetro promedio de burbuja	39
4.7.3.	Retención de gas	46
4.7.4.	Área específica transferencia de masa	48
4.7.5.	Secuestrante de oxígeno	48
4.7.6.	Transferencia de calor desde la resistencia eléctrica al fluido de proceso . .	51
4.7.7.	Flujo volumétrico de salida del tanque aireado	51
4.7.8.	Concentración de equilibrio de oxígeno disuelto en agua	52
4.7.9.	Otras ecuaciones constitutivas	52
4.8.	Grados de libertad	53
4.9.	Solución numérica del modelo matemático	53
4.9.1.	Diseño experimental de las entradas del modelo matemático	53
4.9.2.	Identificación de parámetros	54
4.10.	Validación del modelo matemático	58
5.	Conclusiones y trabajo futuro	64
5.1.	Conclusiones	64
5.2.	Trabajo futuro	65
A.	Anexo: Modelo semifísico de base fenomenológica de una planta piloto de aireación por difusión	66
	Bibliografía	70

Lista de Figuras

2-1.	Teoría de la doble película. Tomada de [22]	9
2-2.	Transferencia de oxígeno en tanques aireados por difusión.	11
2-3.	Contacto entre una partícula de líquido y la burbuja de gas. Tomada de [57]	17
2-4.	Teoría de la penetración de Higbie. Tomada de [57].	17
4-1.	Planta piloto aireada por difusión.	27
4-2.	Difusor de aire, diseño e instalación.	28
4-3.	Diagrama de bloques de los sistemas de proceso.	32
4-4.	Etapas de formación de una burbuja. Tomado de [59].	39
4-5.	Fuerzas que actúan sobre una burbuja.	40
4-6.	Solución del modelo de formación de burbuja para $Q_e = 5,83 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ y $H = 0,35 \text{ m}$.	45
4-7.	Superficie de respuesta del modelo de formación de burbuja a diferentes valores de H y Q_e .	46
4-8.	Cambio de la retención de gas con respecto al diámetro de la burbuja.	48
4-9.	Cambio de la retención de gas con respecto a la velocidad superficial del gas.	49
4-10.	Cambio del área específica de transferencia de masa con respecto a la retención del gas y el diámetro de la burbuja.	50
4-11.	Variables de entrada aplicadas al modelo matemático y la planta piloto de aireación.	54
4-12.	Respuesta dinámica y validación del modelo para (a) nivel y (b) temperatura.	56
4-13.	Respuesta dinámica y validación del modelo para (a) concentración de oxígeno disuelto y (b) secuestrante de oxígeno.	57
4-14.	Respuesta dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_{II}$, usando diferentes correlaciones empíricas y teóricas para el coeficiente de transferencia de masa.	61
4-16.	Respuesta dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_{III}$, usando diferentes correlaciones empíricas y teóricas.	62
4-15.	Respuesta dinámica del coeficiente volumétrico de transferencia empleando diferentes expresiones matemáticas.	63

Lista de Tablas

4-1. Parámetros de diseño del difusor.	28
4-2. Clasificación en variables, parámetros y constantes.	38
4-3. Parámetros para la solución del modelo de formación de burbuja.	44
4-4. Grados de libertad del modelo matemático	53
4-5. Porcentajes de error para las dinámicas de nivel, temperatura y concentración de oxígeno disuelto.	57
4-6. Parámetros óptimos e índices de error.	62
A-1. Símbolos relacionados con el modelo de proceso	68

Lista de Símbolos y Abreviaturas

Letras latinas

Símbolo	Descripción	Unidades
g	Aceleración de la gravedad	m/s^2
z	Altura con respecto al nivel de referencia	m
f	Ancho de la banda de aireación	m
B	Ancho del tanque de aireación	m
W	Ancho del tanque de aireación	m
A_T	Área de la sección transversal del tanque	m^2
A_d	Área del difusor	m^{-1}
a	Área específica de transferencia de masa	m^2
S_a	Área superficial de difusor	m^2
A_{to}	Área transversal del orificio del difusor	m^2
c	Cantidad de orificios del difusor	Adimensional
C_P	Capacidad calorífica del líquido	$J/kg/K$
$Q_{a,n}$	Caudal nominal de aire comprimido que ingresa al difusor	m^3/s
k_G	Coefficiente de transferencia de masa de la fase gaseosa	m/s
k_L	Coefficiente de transferencia de masa de la fase líquida	m/s
C_X	Concentración de biomasa	kg/m^3
$C_{O_2}^*$	Concentración de saturación de oxígeno disuelto en agua	kg/m^3
C_{OS}	Concentración de secuestrante de oxígeno	kg/m^3
C_A	Concentración del componente que se está transfiriendo	kg/m^3
C_{O_2}	Concentración másica de oxígeno disuelto	kg/m^3
k_0	Constante del orificio	Adimensional
d_t	Diámetro de la tubería del difusor	m
d	Diámetro del impulsor	m
d_o	Diámetro del orificio del difusor	m
D_t	Diámetro del tanque cilíndrico	m
d_b	Diámetro promedio de burbuja	m

Símbolo	Descripción	Unidades
D_L	Difusividad del gas en el líquido	m^2/s
u	Energía interna por unidad de masa	m^2/s^2
H_I	Entalpia en el $SdeP_I$	J
H_{II}	Entalpia en el $SdeP_{II}$	J
H_{III}	Entalpia en el $SdeP_{III}$	J
\hat{H}	Entalpía específica	J/kg
E	Espesor de la pared del orificio	m
n	Factor de distribución	Adimensional
\dot{m}	Flujo másico	kg/s
\dot{m}	Flujo másico	kg/s
\dot{n}	Flujo molar de secuestrante de oxígeno	$kmol/s$
\dot{v}	Flujo volumétrico	m^3/s
Q_a	Flujo volumétrico de aire	m^3/s
u_p	Fracción de bombeo a la salida del tanque auxiliar	Adimensional
u_b	Fracción de apertura de la válvula de aire a la entrada del tanque aireado	Adimensional
u_v	Fracción de apertura de la válvula de salida de líquido del tanque aireado	Adimensional
F	Fuerza	N
g_c	Gravedad específica	Adimensional
I	Intensidad de la aireación	W
L_d	Longitud de la tubería recorrida por el aire dentro del difusor	m
M_{II}	Masa total en el $SdeP_{II}$	kg
M_{III}	Masa total en el $SdeP_{III}$	kg
M_I	Masa total en el $SdeP_I$	kg
$N_{OS,i}$	Moles totales de secuestrante de oxígeno en la corriente i	kg
L	Nivel del líquido	m
Fr	Número de Froude	Adimensional
Re	Número de Reynolds	Adimensional
z_o	Orden de la reacción con respecto al secuestrante de oxígeno	Adimensional
a_i con $i = 1, 2, 3, , 6$	Parámetros sintonizables	Adimensional
u_r	Posición del relé del intercambiador de calor	Adimensional
P_g	Potencia consumida por la aireación	W
P_a	Potencia consumida por la mezcla del caldo de cultivo aireado	W
P_{atm}	Presión atmosférica	Pa

Símbolo	Descripción	Unidades
P_0	Presión de entrada al difusor	Pa
P_b	Presión en la burbuja	Pa
P_p	Presión en la cámara del difusor	Pa
H	Profundidad de los difusores	m
r_b	Radio de la burbuja	m
u_{OS}	Secuestrante de oxígeno adicionado al medio	kg
T	Temperatura	K
t_c	Tiempo de contacto entre la burbuja de gas y la partícula de líquido	s
r	Velocidad de consumo o generación	kg/s
v	Velocidad	m/s
V_L	Velocidad ascendente del líquido en la zona de burbujeo	m/s
\dot{r}_{O_2}	Velocidad de consumo de oxígeno debido a la acción del secuestrante	kg/s
\dot{r}_{OS}	Velocidad de consumo de secuestrante de oxígeno	$kmol/s$
N	Velocidad de rotación del impulsor	rpm
N_{O_2}	Velocidad de transferencia de oxígeno	kg/s
\dot{Q}	Velocidad del flujo de energía	W
V_G	Velocidad superficial del gas	m/s
ν_L	Viscosidad cinemática del líquido	m^2/s
V_b	Volumen de la burbuja	m^3
V_{II}	Volumen del $SdeP_{II}$	m^3
V_{III}	Volumen del $SdeP_{III}$	m^3
V_I	Volumen del $SdeP_I$	m^3
V_p	Volumen del difusor	m^3
V	Volumen del medio	m^3
V_t	Volumen del tanque cilíndrico	m^3
k_{OS}	Coficiente cinético de consumo de oxígeno	$\frac{(Kmol/m^3)^{1-z}}{s}$
k_s	Coficiente cinético de consumo de secuestrante de oxígeno	$\frac{(Kmol/m^3)^s}{s}$

Letras griegas

Símbolo	Descripción	Unidades
ρ	Densidad	kg/m^3
η	Factor de corrección de temperatura	Adimensional
α	Factor de corrección para efectos de aireación	Adimensional
α_g	Factor dependiente de la viscosidad del gas	Adimensional
u_v	Fracción de apertura de la válvula manual	Adimensional
G	Gravedad específica	Adimensional
β	Parámetros de sintonización	Adimensional
δ	Parámetros de sintonización	Adimensional
ϕ_i	Parámetros sintonizables con $i = 1, 2, 3, , 6$	Adimensional
σ	Relación de calor específico para el gas	Adimensional
ϵ_G	Retención de gas	Adimensional
γ	Tensión superficial	kg/s^2
λ	Tiempo característico del material	s
μ	Viscosidad dinámica	kg/ms
V_P	Volumen de la cámara del difusor	m^3

Subíndices

Símbolo	Descripción
1	Corriente 1
2	Corriente 2
3	Corriente 3
G	gas
L	líquido
O_2, G	Oxígeno disuelto en el gas
O_2, L	Oxígeno disuelto en el líquido
OS	Secuestrante de oxígeno
I	Sistema de proceso I
II	Sistema de proceso II
III	Sistema de proceso III

Abreviaturas

Símbolo	Descripción
MSBF	Modelo semifísico de base fenomenológica
OD	Oxígeno disuelto
PTAR	Planta de tratamiento de aguas residuales

1. Introducción

El tratamiento biológico de aguas residuales es un proceso mediante el cual se realiza la remoción gradual de los contaminantes presentes en el agua, a través de dos etapas. En la primera etapa, llamada tratamiento primario, se realiza la separación física de contaminantes del agua residual. En la segunda etapa, llamada tratamiento secundario, se realiza la remoción de componentes orgánicos y sólidos suspendidos en el agua residual. El tratamiento secundario se refiere al proceso biológico al cual es sometido el agua residual con el fin de remover contaminantes de esta, principalmente compuestos orgánicos. En esta etapa el agua residual es puesta en contacto con una suspensión concentrada de biomasa bacteriana (lodo activado) que se encarga de degradar dichos compuestos orgánicos [49].

Las aguas residuales contienen gran cantidad de microorganismos como virus, bacterias y protozoos, que generan enfermedades en los seres vivos, tales como gastroenteritis y diarrea que se encuentran entre las tres principales causas de muerte en el mundo [50]. Debido a lo anterior, los requisitos con respecto a las condiciones de las aguas residuales al momento de su descarga son cada vez más estrictos, por lo tanto es necesario emplear estrategias de control robustas y sofisticadas que puedan asegurar que se cumplan las condiciones mínimas para realizar la descarga [8].

La aireación u oxigenación es el proceso mediante el cual el aire u oxígeno puro circulan a través de un líquido o sustancia con el cual son mezclados o disueltos. Dicho procedimiento es el más usado para garantizar la oxigenación de los microorganismos en proceso industriales, se basa en el uso de tanques de aireación, los cuales son básicamente biorreactores que permiten el flujo ascendente de aire (u oxígeno puro) desde el fondo del tanque, permitiendo así la transferencia de oxígeno desde el gas hacia el líquido. Por lo anterior, esta operación de transferencia de masa es de suma importancia a nivel industrial así como para la prestación de servicios públicos, ya que de ella depende la preservación del microorganismo en el caso de fermentaciones o el consorcio de microorganismo como lodos activados en los sistemas de tratamiento biológico de aguas residuales.

El proceso de aireación es una de las etapas de mayor importancia en plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR), debido a que esta se encarga de las tareas de transferencia de oxígeno y mezcla del medio. El oxígeno es usado para realizar el proceso de oxidación de la materia orgánica. La mezcla es necesaria para garantizar que las concentraciones de oxígeno disuelto sean aproximadamente iguales en todo el sistema. Debido a que los requerimientos de oxígeno se suplen por medio de máquinas que inyectan aire u oxígeno en el biorreactor, la aireación se constituye como

un proceso de alto consumo energético, representando entre 60 – 65 % del consumo total de una PTAR, por lo que es esencial controlar la concentración de oxígeno disuelto. Una tasa muy baja de oxígeno disuelto puede generar un bajo crecimiento del lodo y una baja remoción de contaminante, a su vez una alta concentración de oxígeno disuelto puede generar una inhibición en el crecimiento del lodo, por lo que se podría presentar una pobre eficiencia en la sedimentación del lodo al igual que un bajo rendimiento en la remoción de contaminantes [47].

El tratamiento de aguas residuales sigue siendo un tema de investigación activo desde el punto de vista del monitoreo y control de planta debido a la constante evolución de la normatividad que requiere especificaciones más ajustadas y exigentes en cuanto al contenido de contaminantes presentes en el agua. El control de la concentración de oxígeno disuelto (OD) en una PTAR es crucial para mantener la calidad del lodo y de ésta manera la eficiencia en la remoción de contaminantes [24].

Debido a la importancia del proceso de aireación para la transferencia de oxígeno en las PTAR y en procesos bioquímicos aeróbicos, la transferencia de oxígeno ha sido un fenómeno ampliamente estudiado [53, 48, 3, 23], sin embargo, una cantidad considerable de estos estudios realizan un análisis empírico, es decir, desde los datos de este fenómeno. Por lo tanto, en la tesis que se presenta se realizó un estudio de la dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en sistemas aireados desde el fenómeno, con el fin de obtener un modelo matemático que ayude a comprender la forma en la que se da la transferencia de masa y poder emplear a futuro este modelo en tareas de control, que permitan garantizar una óptima concentración de oxígeno disuelto y en la medida de lo posible disminuir los costos energéticos debido al proceso de aireación.

Este documento está organizado de la siguiente manera: en el Capítulo 2 se presentan las bases teóricas y el estado del arte con respecto a modelos matemáticos y transferencia de masa en sistemas aireados, en este capítulo se presentan las expresiones matemáticas de naturaleza empírica y teórica empleadas en la determinación del coeficiente volumétrico de transferencia de masa y adicionalmente el planteamiento del problema, la hipótesis, los objetivos y la principal contribución. En el Capítulo 3 se presenta la metodología de modelado empleada en el desarrollo de la tesis de maestría. En el Capítulo 4 se muestra el desarrollo del modelo matemático siguiendo los pasos de modelado presentados en la metodología, además de la ecuación constitutiva propuesta en la tesis de maestría, junto con el análisis y discusión de los resultados del modelo matemático y su validación. Finalmente, en el Capítulo 5 se encuentran las principales conclusiones de esta tesis y se proponen algunos trabajos futuros.

Los principales productos de investigación relacionados con este trabajo son:

Artículos de conferencia

- Ruiz-Botero, M., Ospina-Alarcón, M. y García-Tirado, J. (2015). “Transferencia de Oxígeno en Procesos Aerobios: Una Revisión al Modelado Fenomenológico. 2nd Colombian Confe-

rence on Automatic Control - CCAC IEEE. IEEE Explore Digital Library. Manizales Colombia.

- Ruiz-Botero, M., Ospina-Alarcón, M. y García-Tirado, J. (2016). “Output-Feedback Model Predictive Control for Dissolved Oxygen Control in a Biological Wastewater Treatment Plant. XVII CLCA Latin American Conference of Automatic Control. Medellín, Colombia.

Artículos de revista

- Ruiz-Botero, M., Zuluaga-Bedoya, C., Ospina-Alarcón, M. y García-Tirado, J. (2016). “Comparación de correlaciones empíricas para la estimación del coeficiente de transferencia de oxígeno en bioprocesos aeróbicos. Revista Ingenierías USBMed; Vol 7, N:2. Pág. 14-20.
- Zuluaga-Bedoya, C., Ruiz-Botero, M., Ospina-Alarcón, M. y García-Tirado, J. (2018). “A Dynamical Model of an Aeration Plant for Wastewater Treatment using a Phenomenological based Semi-physical Modeling Methodology”. Computers & Chemical Engineering. (Aceptado para publicación).

2. Marco Teórico y Estado del Arte

En este capítulo se presentan los principales conceptos teóricos relacionados con los modelos matemáticos de procesos químicos y bioquímicos, además de los principales estudios realizados en el tema de transferencia de masa en sistemas aireados, necesarios para el desarrollo de la tesis de maestría.

2.1. Modelos matemáticos de procesos químicos y bioquímicos

Un modelo matemático es una representación de la realidad mediante ecuaciones diferenciales y/o algebraicas. En el proceso de construcción de un modelo lo que se busca es realizar la traducción de un problema del mundo real a un problema matemático equivalente. El desarrollo de modelos se realiza con el fin de aumentar el conocimiento sobre la situación original del mundo real o para utilizar el modelo con fines de control, optimización y en otros casos estudios de seguridad [19].

Los modelos matemáticos son representaciones aproximadas de un sistema usados para reproducir el comportamiento de este bajo diversas condiciones de operación. Dichos modelos formalizan en un lenguaje matemático los fenómenos presentes en el proceso mediante las leyes que los rigen [51].

Como lo proponen en [4], un modelo de proceso se define como *“una abstracción útil del objeto real, que resulta ser un constructo operable, bien sea tangible o intangible. Un modelo es un conjunto de elementos de representación de información que puestos juntos (como un Sistema), replican las características de un Proceso real o una parte de este, tomado como un Sistema. El modelo de Proceso es en si mismo un Sistema”*

Tal como se presenta en [4], los modelos matemáticos poseen una estructura que presenta la forma en la que se relacionan las partes de este. Dicha estructura está formada por términos, los cuales a su vez están constituidos por parámetros, variables y constantes, unidos mediante operadores no lineales. Los términos entre si se separan por medio de operaciones lineales de suma y resta. Los parámetros de un modelo son símbolos a los cuales se les asigna un valor numérico y da cuenta del grado en el que se relacionan las partes de un sistema. Dichos parámetros pueden ser valores constantes o variables que se rigen por una ley determinada, además estos parámetros pueden

ser clasificados en estructurales, asociados con la configuración del modelo, y funcionales, asociados con la solución numérica del modelo. Las variables de un modelo son características del objeto real, cuyo valor puede ser conocido o desconocido, en el caso de ser desconocido se intenta hallar por medio de tanteo o mediante la simulación del modelo bajo diferentes escenarios de operación. Las variables, como su nombre lo dice, varían por sí mismas y bajo la influencia de los demás elementos del modelo. Finalmente, las constantes son variables universalmente aceptadas como de valor fijo o que el modelador acepta de valor fijo para el caso de análisis que está tratando.

Clasificación de los modelos

Existen múltiples clasificaciones para los modelos entre las que se encuentran: modelos lineales y modelos no lineales, modelos continuos y modelos discretos, modelos causales y modelos no causales, modelos estáticos y modelos dinámicos, modelos estocásticos y modelos determinísticos, modelos variantes en el tiempo y modelos invariantes en el tiempo, modelos explicativos, modelos descriptivos y modelos puramente predictivos, modelos de parámetros distribuidos y modelos de parámetros concentrados.

Teniendo en cuenta la clasificación presentada, el modelo matemático desarrollado en esta tesis es no lineal, continuo, causal, dinámico, determinístico, variante en el tiempo, explicativo y de parámetros concentrados. Además, basándose en el grado de conocimiento del proceso implícito en el modelo existen tres tipos de modelos los cuales se presentan a continuación:

- **Modelos caja blanca, físicos o fenomenológicos:** los modelos de caja blanca son obtenidos teniendo como base el conocimiento detallado de los fenómenos que están presentes en el sistema, es decir, hay un conocimiento detallado de todas las variables involucradas en el sistema y de cómo se relacionan entre ellas. La estructura de este tipo de modelos se obtiene a partir de la aplicación de leyes de conservación (balances de masa y energía). Adicionalmente, en este tipo de modelos las ecuaciones de balance se acompañan de ecuaciones constitutivas que permiten determinar los parámetros del modelo [4, 11].
- **Modelos caja negra o empíricos:** los modelos empíricos se determinan a partir de datos experimentales disponibles del proceso, por lo tanto se basan en la observación de un comportamiento específico del sistema. Su estructura es generalmente una caja negra que no puede ser interpretada en términos de las variables y su relación entre ellas, tal como sucede en modelos caja blanca. Para la elaboración de este tipo de modelos se debe seleccionar cuidadosamente una estructura que relacione las variables que se quieren predecir en términos de las variables medidas. Si la selección de dicha estructura no es la adecuada, el modelo matemático no tendrá la capacidad de predecir con suficiente exactitud lo que sucede en el proceso real [19].
- **Modelos caja gris o semiempíricos:** los modelos caja gris son un punto intermedio entre los modelos fenomenológicos y los modelos empíricos, ya que son una combinación de modelos

de caja negra y modelos de caja blanca. Estos modelos se construyen usando como punto de partida un modelo semilla que puede ser de estructura fenomenológica o empírica [4].

Para obtener un modelo de caja gris existen dos maneras diferentes: *i*) obtener una estructura de un modelo fenomenológico (balances de materia, energía y cantidad de movimiento) y determinar algunos parámetros que no pueden ser explicados mediante una estructura explicativa, a partir de correlaciones empíricas. Estos se denominan Modelos Semifísicos de Base Fenomenológica (MSBF), *ii*) obtener una estructura empírica y determinar algunos parámetros a partir de estructuras basadas en el conocimiento fenomenológico. Estos se denominan Modelos Semifísicos de Base Empírica.

2.2. Estructura de un modelo semifísico de base fenomenológica

Generalmente, en procesos químicos y bioquímicos las propiedades balanceables son la materia y la energía. Los balances de energía, materia y cantidad de movimiento, sirven para obtener y relacionar las variables más importantes del proceso [4].

2.2.1. Ecuaciones de balance de masa, energía y cantidad de movimiento

El comportamiento de un sistema puede ser estudiado siguiendo los cambios de estado que experimenta un proceso y los flujos de masa, energía y cantidad de movimiento que atraviesan los límites del sistema. En (2-1) se presenta la ecuación general de balance [19].

$$\begin{aligned} \left[\begin{array}{c} \text{Variación neta} \\ \text{de la cantidad} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] &= \left[\begin{array}{c} \text{Entrada} \\ \text{de la cantidad} \\ \text{al sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Salida} \\ \text{de la cantidad} \\ \text{del sistema} \end{array} \right] \\ &+ \left[\begin{array}{c} \text{Generación} \\ \text{de la cantidad} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Consumo o desaparición} \\ \text{de la cantidad} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (2-1)$$

Balance de masa: teniendo en cuenta lo anterior, en un sistema de proceso en el cual se presenta reacciones de generación y consumo, la ecuación para el balance total de masa durante un tiempo dt es [19]:

$$\frac{dm}{dt} = \sum_{i=1}^n \partial \dot{m}_{entra} - \sum_{j=1}^k \partial \dot{m}_{salida} - \sum_{c=1}^o \dot{r}_c + \sum_{g=1}^p \dot{r}_g \quad (2-2)$$

donde $\frac{dm}{dt}$ representa la variación de la masa con el tiempo dentro del sistema, $\partial\dot{m}_{entra}$, representan la cantidad diferencial de flujo de masa que entra por la corriente i -ésima, i , con $i = 1, 2, 3, \dots, n$, $\partial\dot{m}_{salida}$ representan la cantidad diferencial de flujo de masa que sale del sistema por la corriente j -ésima, j , con $j = 1, 2, 3, \dots, k$, \dot{r}_c son diferentes fuentes de consumo que se presentan en el sistema, con $c = 1, 2, 3, \dots, o$ y \dot{r}_g son las diferentes fuentes de generación de un componente particular con $g = 1, 2, 3, \dots, p$.

Balance de energía: la ecuación de balance energético para un sistema en el cual se lleva un proceso es:

$$\begin{aligned}
 \left[\begin{array}{l} \text{Cambio con el} \\ \text{tiempo de la} \\ \text{cantidad de} \\ \text{energía interna,} \\ \text{cinética y potencial} \\ \text{dentro del sistema} \end{array} \right] &= \left[\begin{array}{l} \text{Flujo de energía} \\ \text{interna, cinética} \\ \text{y potencial que} \\ \text{entra al sistema} \\ \text{por convección} \\ \text{o difusión} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Flujo de energía} \\ \text{interna, cinética} \\ \text{y potencial que} \\ \text{sale al sistema} \\ \text{por convección} \\ \text{o difusión} \end{array} \right] \\
 &+ \left[\begin{array}{l} \text{Calor} \\ \text{suministrado al} \\ \text{sistema por} \\ \text{conducción} \\ \text{radiación y} \\ \text{reacción} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Trabajo} \\ \text{hecho por el} \\ \text{sistema sobre} \\ \text{los alrededores} \end{array} \right]
 \end{aligned} \tag{2-3}$$

Planteando un balance de energía entre un tiempo t y un tiempo $t + dt$, se tiene: $\frac{dE_{sistema}}{dt}$ que representa la variación de la energía total dentro del sistema con respecto al tiempo, en ausencia de efectos eléctricos, de tensión superficial y de distorsión de sólidos:

$$\frac{dE_{sistema}}{dt} = \frac{d}{dt} \sum \left(mu + \frac{mv^2}{2g_c} + \frac{mgz}{g_c} \right)_{sistema} \tag{2-4}$$

donde u es la energía interna por unidad de masa, v la velocidad, g la gravedad, g_c es la gravedad específica y z la altura con respecto al nivel de referencia.

2.2.2. Ecuaciones constitutivas

Cuando se aplican los balances de materia y energía en un sistema de proceso, pueden encontrarse parámetros del modelo que requieran de una definición o cálculo. Las ecuaciones constitutivas en general son ecuaciones algebraicas, que se originan a partir de principios termodinámicos, cinéticas de reacción, ecuaciones de velocidad de transferencia y restricciones del equipo [19]. En la mayoría de los casos estas ecuaciones son el resultado de conocimiento empírico del fenómeno

[6].

Ecuaciones de velocidad de transferencia: en muchas aplicaciones la masa, la energía y la cantidad de movimiento son transferidas hacia afuera o hacia adentro a través de las fronteras del sistema de proceso. Esto sucede, sobre todo, cuando se tienen sistemas multifásicos que involucran materia y energía entre las fases. Por ello, existen fuerzas que potencian la transferencia de materia y energía entre las fases. Estas fuerzas generalmente están dadas en términos de la concentración, la temperatura y la presión diferencial [4, 5].

Relaciones termodinámicas: las propiedades termodinámicas son importantes para el modelado de procesos. En gran cantidad de aplicaciones de modelado y simulación se tiene la necesidad de predecir densidades, viscosidades, conductividades térmicas y capacidades caloríficas para líquidos, vapores o mezclas. Para ello se utilizan correlaciones simples y aplicables al intervalo de validez del modelo [4, 5].

Relaciones de propiedades: estas van desde simples relaciones lineales a relaciones polinomiales complejas en términos de las principales propiedades termodinámicas intensivas del sistema, como temperatura, presión o concentración. La aplicación de las relaciones polinomiales depende directamente del intervalo de uso de esas correlaciones. Para una mezcla, las propiedades se estiman a partir de la información de los componentes puros. Cuando se presentan grandes variaciones de la condición ideal, debido a operaciones a alta presión o a la naturaleza de los componentes del sistema, la opción es usar una predicción de las propiedades que incorpore un término de corrección para la no-linealidad [4, 5].

2.3. Transferencia de oxígeno en sistemas gas- líquido

La transferencia de masa se produce en mezclas que contienen variaciones de concentración. La masa se transfiere desde una ubicación a otra bajo la influencia de una diferencia de concentración o gradientes de concentración en el sistema. En gran cantidad de bioprocesos se producen situaciones en las cuales las concentraciones de los compuestos no son uniformes, por lo tanto, los mecanismos de transferencia de masa se encargan de transportar el compuesto desde una región de alta concentración a una región de baja concentración [22].

2.3.1. Balance de oxígeno

El modelado de la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a fase líquida está basada en la teoría de la película [22]. Este modelo se basa en la formación de una película de líquido o una capa límite siempre y cuando exista contacto entre dos fases (gas-líquido).

En la Figura 2-1, se muestra el gradiente de concentraciones que se presenta en la interfase entre las fases gas-líquido que continen oxígeno (O_2). Donde el O_2 es transferido desde la fase gaseosa a la fase líquida. La concentración de O_2 en el seno del líquido es C_{O_2L} y en la interface del lado del líquido es $C_{O_2L_i}$. Por el lado de la fase gaseosa la concentración de O_2 es C_{O_2G} en el seno y $C_{O_2G_i}$ en la interface.

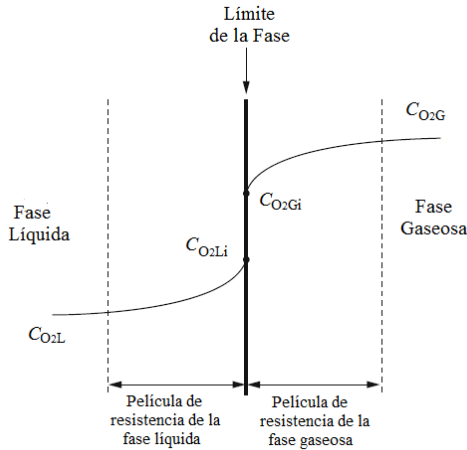


Figura 2-1.: Teoría de la doble película. Tomada de [22]

La velocidad de transferencia del O_2 a través de la capa límite del gas, \dot{N}_{O_2G} , está dada por (2-5).

$$\dot{N}_{O_2G} = k_G a (C_{O_2G} - C_{O_2G_i}) \quad (2-5)$$

Análogamente, la velocidad de transferencia de O_2 a través de la capa límite del líquido, \dot{N}_{O_2L} , está dada por (2-6):

$$\dot{N}_{O_2L} = k_L a (C_{O_2L_i} - C_{O_2L}) \quad (2-6)$$

Donde k_G y k_L son los coeficientes de transferencia de oxígeno de la fase gaseosa y la fase líquida, respectivamente, a es el área específica de transferencia de masa, C_{O_2} es la concentración de oxígeno, en el gas (G), en la capa límite del lado del gas (G_i), en el líquido (L) y en la capa límite del lado del líquido (L_i). Las concentraciones de equilibrio en la interfase se pueden relacionar por (2-7):

$$C_{O_2G_i} = n C_{O_2L_i} \quad (2-7)$$

donde n es el factor de distribución.

El coeficiente global de transferencia de oxígeno se puede escribir en función de los coeficientes de transferencia de masa. En el caso del coeficiente de la fase gaseosa la relación es:

$$\frac{1}{K_G a} = \frac{1}{k_G a} + \frac{n}{k_L a} \quad (2-8)$$

En cambio, el coeficiente global de transferencia en la fase líquida viene dado por (2-9):

$$\frac{1}{K_L a} = \frac{1}{n k_G a} + \frac{1}{k_L a} \quad (2-9)$$

Por lo tanto, la velocidad de transferencia de oxígeno en sistemas gas-líquido se puede expresar por medio de (2-10) y (2-11).

$$\dot{N}_{O_2} = K_G a (C_{O_2 G} - n C_{O_2 L}) \quad (2-10)$$

$$\dot{N}_{O_2} = K_L a \left(\frac{C_{O_2 G}}{n} - C_{O_2 L} \right) \quad (2-11)$$

Las Ecuaciones (2-10) y (2-11) son generalmente usadas en términos de concentraciones de equilibrio. $n C_{O_2 L}$ es igual a $C_{O_2 G}^*$, la concentración de O_2 en la fase gaseosa en equilibrio con $C_{O_2 L}$ y $\frac{C_{O_2 G}}{n}$ es igual a $C_{O_2 L}^*$, la concentración de O_2 en la fase líquida en equilibrio con $C_{O_2 G}$. Por lo tanto (2-10) y (2-11) se pueden escribir como:

$$\dot{N}_{O_2} = K_G a (C_{O_2 G} - C_{O_2 G}^*) \quad (2-12)$$

$$\dot{N}_{O_2} = K_L a (C_{O_2 L}^* - C_{O_2 L}) \quad (2-13)$$

En sistemas donde la mayor parte de la resistencia a la transferencia de masa se da en la película interfacial de la fase gaseosa o la película interfacial de la fase líquida (2-12) y (2-13) pueden ser simplificadas. En un sistema aire-agua, el O_2 es poco soluble en el agua, por lo cual la resistencia a la transferencia de oxígeno es dominada por la fase líquida y $k_G a$ es mucho más grande que $k_L a$. De (2-9), $K_L a$ es aproximadamente igual a $k_L a$, por lo tanto (2-13) puede ser simplificada y representada por (2-14):

$$\dot{N}_{O_2} = \frac{dC_{O_2 L}}{dt} = k_L a (C_{O_2 L}^* - C_{O_2 L}) \quad (2-14)$$

2.3.2. Coeficiente de transferencia de masa

En la literatura especializada se registran diferentes tipos de estudios acerca de la transferencia de masa en sistemas gas-líquido [33, 38, 48, 53]. En dichos estudios, se presentan diferentes expresiones que permiten determinar el coeficiente de transferencia. Estas expresiones pueden ser de base teórica o de base empírica, tal como se presenta a continuación.

Expresiones empíricas

Para determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa se han presentado estudios en los que se proponen correlaciones empíricas (Ver Figura 2-2). Dichos estudios pueden ser clasificados en tres categorías basándose en el tipo de reactor empleado, columnas de burbujeo, tanques cuadrados y tanque cilíndricos.

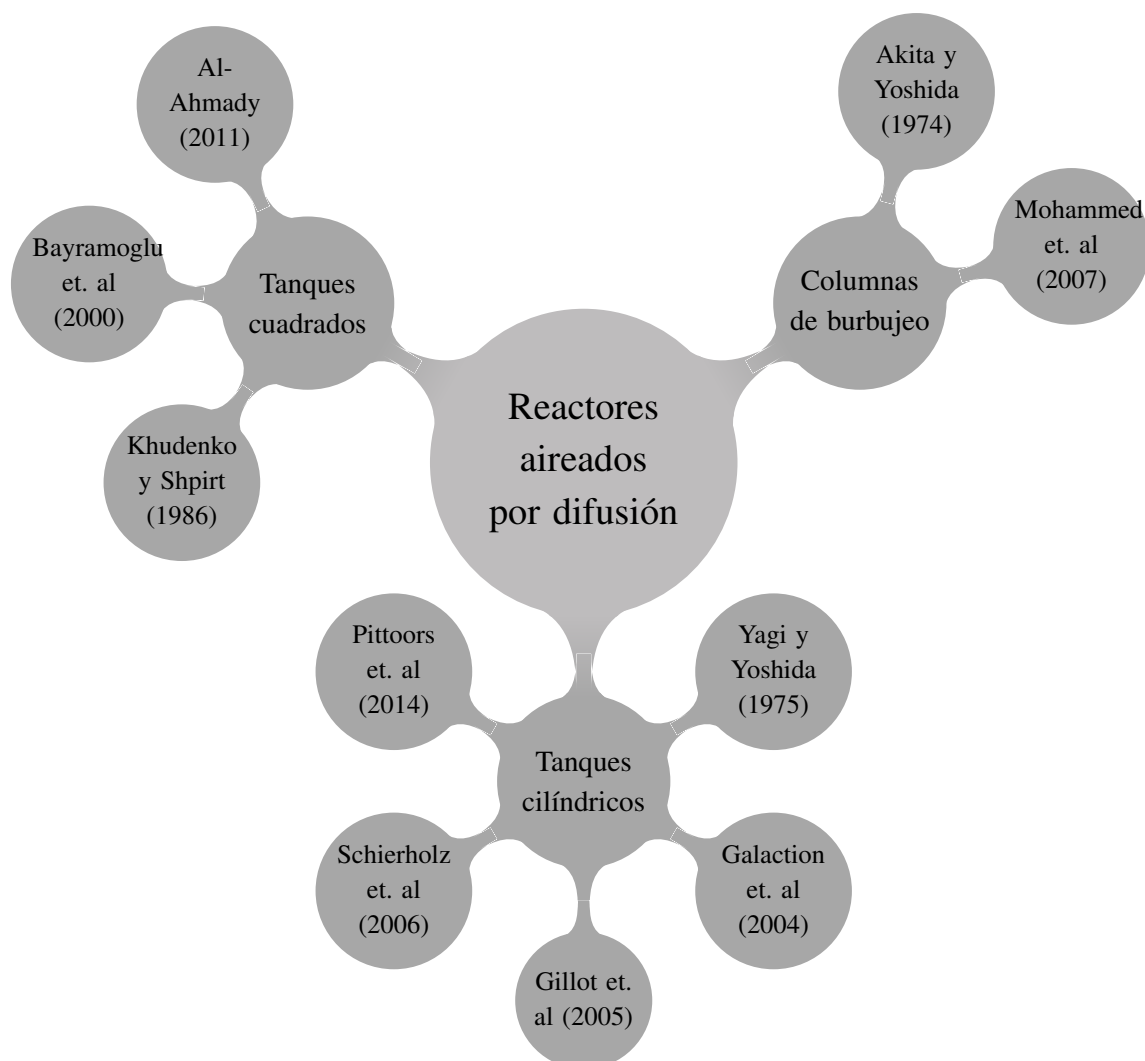


Figura 2-2.: Transferencia de oxígeno en tanques aireados por difusión.

■ Columnas de burbujeo

Regularmente, los modelos presentados por diferentes autores para caracterizar la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida, hacen uso de un gran número de correlaciones para determinar parámetros involucrados en el modelo, como son el coeficiente de transferencia de masa, la retención de gas, el área interfacial de transferencia de masa, entre otros. Sin embargo, estas correlaciones son específicas para un intervalo estrecho de condiciones de operación para el que se desarrollan. Un ejemplo de lo anterior es la correlación (2-15) presentada en [2], la cual es adecuada para diámetros de columna no mayores a 60 cm, velocidad superficial del gas mayor a 1500 $\frac{m}{h}$ y porcentajes de retención de gas mayores a 30%. Los experimentos realizados para determinar si la correlación se ajusta a los resultados reales se desarrollan en diámetros de columna de 7,7 cm y 15,0 cm, cuyos resultados muestran un ajuste adecuado. Sin embargo, los autores concluyen que la correlación propuesta es apropiada para el intervalo de operación mencionado al realizar la comparación entre los datos que arroja la correlación con datos experimentales obtenidos en investigaciones previas realizadas por éstos.

$$\frac{k_L d_b}{D_L} = 0,5 \left(\frac{\nu_L}{D_L} \right)^{1/2} \left(\frac{g d_b^3}{\nu_L^2} \right)^{1/4} \left(\frac{g d_b^2 \rho_L}{\gamma} \right)^{3/8} \quad (2-15)$$

donde, d_b es el diámetro medio de la burbuja, D_L es la difusividad de la fase líquida, ν_L es la viscosidad cinemática del líquido, g es la aceleración de la gravedad, ρ_L es la densidad del líquido y γ es la tensión superficial.

Otra investigación sobre la transferencia de masa en columnas de burbujeo es la presentada en [31]. En esta se evalúan los efectos de la temperatura y la velocidad superficial del gas en el coeficiente volumétrico de transferencia de masa $k_L a$. A partir de los resultados los investigadores proponen la correlación (2-16), con V_G es la velocidad superficial del gas y T es la temperatura.

$$k_L a = -3,35619 + 0,41314V_G + 0,09002T + 0,000137V_G^2 - 0,000079T^2 - 0,01032V_G T \quad (2-16)$$

■ Tanques rectangulares

Tal como se presentó para columnas de burbujeo, a lo largo de los años se han publicado estudios en los que se proponen correlaciones que permiten determinar el coeficiente de transferencia de masa para sistemas aireados en tanques rectangulares. Uno de ellos es el presentado en [40]. En dicho estudio, los investigadores realizan un análisis dimensional

donde obtienen una ecuación que permite determinar el valor del coeficiente de transferencia de masa, presentada en (2-17). Los investigadores proponen la ecuación teniendo en cuenta que el uso de esta se reduce a sistemas en los que se cumplan las siguientes condiciones: $0,029 \leq f/B \leq 0,125$, $1 \leq L/B \leq 4$, $0,9 \leq L \leq 3,8 \text{ m}$, $2 \leq I \leq 30 \text{ m}^3\text{m}^{-2}\text{H}^{-1}$, donde f es el ancho de la banda de aireación, B es el ancho del tanque de aireación, L es la altura del líquido en el tanque de aireación, I es la intensidad de la aireación y H es la profundidad de los difusores.

$$(K_L a)_T = 0,041 \alpha \eta \left(\frac{H}{d_b} \right)^{0,67} \left(\frac{f}{B} \right)^{0,18} \left(\frac{I}{L} \right) \quad (2-17)$$

donde α es un factor de corrección usado para incluir los efectos en la aireación del agua asociados con la mezcla, η es un factor de corrección por temperatura.

En los estudios presentados en [13] y [3] se presentan correlaciones que también se aplican a intervalos estrechos de operación. En [13] realizan la validación de la correlación mediante la experimentación en seis tanques con diferentes dimensiones cuyo ancho (W) varía entre 6 y 9,3 m, su largo (B) entre 3,8 y 6,5 m y su nivel (L) entre 3,5 y 5 m. A partir de (2-18), los investigadores obtienen un conjunto de parámetros de sintonización para la ecuación que dependen de las condiciones de operación del sistemas y de las dimensiones del tanque. En [3] al igual que en [13] presentan la estructura para la correlación empírica que permite determinar el coeficiente de transferencia de masa y mediante datos experimentales determina un set de valores para el valor constante ϕ y para los exponentes ϕ_1 a ϕ_5 en (2-19).

$$K_L a = a_0 d_b^{a_1} V_G^{a_2} \left(\frac{W}{B} \right)^{a_3} \left(\frac{B}{L} \right)^{a_4} L^{a_5} V_L^{a_6} \quad (2-18)$$

$$K_L a = \frac{\phi}{W^2} Re^{\phi_1} Fr^{\phi_2} \left(\frac{d_b}{L} \right)^{\phi_3} \left(\frac{B}{W} \right)^{\phi_4} \left(\frac{A_d}{A_t} \right)^{\phi_5} \quad (2-19)$$

En (2-18) y (2-19), a_0 a a_6 son parámetros estimados, los cuales son función de las características del agua residual y de algunas características del sistema, V_L es la velocidad ascendente del líquido en la zona de burbujeo, Re es el número de Reynolds, Fr es el número de Froude, A_d es el área del difusor y A_t es el área de la sección transversal del tanque.

■ Tanques cilíndricos

Al igual que para columnas de burbujeo y tanques rectangulares, hay estudios que se han centrado en la propuesta de nuevas correlación para determinar el coeficiente de transferencia de masa en sistemas aireados en tanques cilíndricos (Ver Figura 2-2). El primero de

los estudios que se muestra es el realizado en [62], en el cual los investigadores proponen dos correlaciones empíricas para el coeficiente de transferencia de masa, una para sistemas con líquidos Newtonianos (2-20) y la otra para sistemas en donde se tienen líquidos No-Newtonianos (2-21). Cabe resaltar que así como en los demás estudios presentados, las ecuaciones se obtienen para unas condiciones de operación y propiedades de los fluidos específicas y que el tanque donde se lleva a cabo la operación de transferencia de masa es agitado mecánicamente.

$$\frac{k_L a d^2}{D_L} = 0,060 \left(\frac{d^2 N \rho_L}{\mu_L} \right)^{1,5} \left(\frac{d N^2}{g} \right)^{0,19} \left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \right)^{0,5} \left(\frac{\mu_L V_G}{\gamma} \right)^{0,6} \left(\frac{N d}{V_G} \right)^{0,32} \quad (2-20)$$

$$\frac{K_L a d^2}{D_L} = 0,060 \left(\frac{d^2 N \rho_L}{\mu_L} \right)^{1,5} \left(\frac{d N^2}{g} \right)^{0,19} \left(\frac{\mu}{\rho_L D_L} \right)^{0,5} \left(\frac{\mu_L V_G}{\gamma} \right)^{0,6} \left(\frac{N d}{V_G} \right)^{0,32} \left(1 + 0,2(\lambda N)^{0,5} \right)^{-0,67} \quad (2-21)$$

donde d es el diámetro del impulsor, N es velocidad de rotación del impulsor que para el montaje experimental presentado por los autores fue un turbina de seis palas y λ es el tiempo característico del material.

Otro estudio presentado es el realizado en [26], en este se propone una correlación matemática para determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa ($k_L a$) en función de la concentración y morfología de la biomasa (C_X), la potencia de entrada específica (P_a) y la velocidad superficial del aire (V_G), para varios tipos de cultivos de microorganismos. En (2-22) se muestra la correlación general obtenida por los investigadores. En este estudio se concluyó que la correlación propuesta podría ser usada en el escalado de biorreactores.

$$k_L a = \alpha C_X^\beta \left(\frac{P_a}{V} \right) V_G^\delta \quad (2-22)$$

donde V es el volumen del medio y α , β y δ son los coeficientes que tienen en cuenta la importancia e influencia relativa de las variables consideradas.

El modelo presentado en [30] al igual que el presentado en [48], se basa en el análisis dimensional para caracterizar la transferencia de oxígeno. En [30] se obtiene la ecuación para transferencia de oxígeno en función de la velocidad superficial del gas (V_G), la viscosidad cinemática del agua (ν_L) y la aceleración de la gravedad (g) (2-23) y (2-24). En este estudio, los investigadores concluyen que las correlaciones propuestas, permiten estimar el rendimiento de la oxigenación en el sistema de aireación considerado. En el estudio presentado

en [48], se realiza la caracterización de la transferencia de oxígeno con base en el volumen del tanque cilíndrico, V_t , altura, L , diámetro, D_t , y área superficial, A_t , flujo volumétrico de aire, Q_a , área superficial de los difusores, S_a , y profundidad, H , viscosidad cinemática ν_L , coeficiente de difusión de oxígeno, D_L y gravedad, g , como se presenta en (2-25) y (2-26). En el estudio se realizó la comparación del $k_L a$, en agua con presencia de lodos activados ($k_L a_{AS}$) y agua limpia ($k_L a_{CW}$), a partir de esto los autores concluyeron que las correlaciones propuestas son adecuadas y que la diferencia entre los coeficientes de transferencia de oxígeno para agua en presencia de lodos activados y agua limpia es de aproximadamente 66 % para las mismas condiciones de operación.

$$N_T = \frac{k_L a \nu_L^2}{V_G g} = 7,77 \times 10^{-5} \left(\frac{A_d}{A_t} \right)^{0,24} \left(\frac{A_d}{S_a} \right)^{-0,15} \left(\frac{D_t}{H} \right)^{0,13} \quad (2-23)$$

$$k_L a_{20} = 1,69 Q_a A_t^{-1,18} A_d^{0,10} S_a^{0,15} H^{-0,13} \quad (2-24)$$

$$\frac{D_t^2 k_L a_{AS}}{D_L} = 0,030 Re^{1,718} Fr^{-0,709} \left(\frac{d_b}{h_d} \right)^{-0,291} \left(\frac{L}{D_t} \right)^{-0,554} \left(\frac{A_d}{A_t} \right)^{0,135} \left(\frac{D_t}{H} \right)^{0,321} \left(\frac{L}{H} \right)^{0,086} \left(\frac{V_t}{A_d^{1,5}} \right)^{-0,017} \quad (2-25)$$

$$\frac{D_t^2 k_L a_{CW}}{D_L} = 0,030 Re^{1,906} Fr^{-0,631} \left(\frac{d_b}{h_d} \right)^{-0,23} \left(\frac{L}{D_t} \right)^{-0,120} \left(\frac{A_d}{A_t} \right)^{0,326} \left(\frac{D_t}{H} \right)^{0,164} \left(\frac{L}{H} \right)^{0,173} \left(\frac{V_t}{A_d^{1,5}} \right)^{-0,01} \quad (2-26)$$

En el modelo presentado en [53], se desarrollan dos correlaciones empíricas para determinar el coeficiente de transferencia de oxígeno desde la superficie del agua, $k_L a_S$, (2-27) y el coeficiente de transferencia de oxígeno desde las burbujas, $k_L a_B$, (2-28). En el estudio, los investigadores comprobaron que: $k_L a_B$ es seis veces mayor para sistemas de burbuja fina con respecto a sistemas de burbuja gruesa, $k_L a_B$ aumenta con la profundidad y la velocidad del flujo de aire y $k_L a_S$ incrementa linealmente con el incremento en la velocidad del flujo de aire.

$$k_L a_S = 49 \left(\frac{D_L}{\nu_L} \right)^{1/2} \left(\frac{H^2}{A_t} \right)^{0,28} \quad (2-27)$$

$$k_L a_B = \alpha \left(\frac{D_L}{\nu_L} \right)^{1/2} \left(\frac{Q_a}{A_t} \right)^{6/5} H^{1/10} \quad (2-28)$$

donde D_L es la difusividad del gas en el agua, ν_L es la viscosidad cinemática, H es la profundidad de los difusores, A_t es área de sección transversal del tanque y Q_a es el flujo volumétrico del gas.

Expresiones teóricas

Existen diferentes expresiones que permiten determinar el valor del coeficiente volumétrico de transferencia de masa ($k_L a$). Sin embargo, dichas expresiones son de carácter empírico, ya que son obtenidas mediante datos experimentales y se aplican a estrechos intervalos de operación.

Adicional a las expresiones empíricas que se han presentado en la literatura, existen algunas expresiones teóricas que permiten determinar el coeficiente de transferencia de masa (k_L). Entre las expresiones teóricas propuestas se encuentra la propuesta por Higbie en el año 1935 [33], basada en su teoría de la penetración y la que presenta Kawase et al. en el año 1987 [38] basada en la teoría de la penetración de Higbie, la teoría de Kolgomorof y el trabajo realizado por Kastanek en el año 1977 [37].

■ Higbie 1935

Higbie en [33] presentó la teoría de la penetración, en la que se formula una ecuación de base teórica que permite determinar el coeficiente de transferencia de masa. A diferencia de la teoría de la doble película, en la teoría de la penetración el autor manifiesta que debido al corto tiempo de exposición de un fluido a la transferencia de masa, no se llegan a producir los gradientes de concentración característicos del estado estacionario [57].

La teoría de la penetración de Higbie fue propuesta con el fin de describir el contacto entre dos fluidos (Ver Figura 2-3). Dicha teoría se basa en la premisa de que una burbuja de gas que se encuentra ascendiendo a través de un líquido, tiene contacto con partículas de líquido durante un tiempo t . Una partícula de líquido b , que inicialmente se encuentra en la parte superior de la burbuja de gas, está en contacto con ésta durante el tiempo que la burbuja tarda en ascender una distancia igual a su diámetro, mientras que la partícula de líquido resbala a través de la superficie de la burbuja y finalmente pierde el contacto con ésta [57].

Al principio, cuando la partícula de líquido no está en contacto con la burbuja de gas, la concentración de soluto en el líquido es $C_{A,0}$, es decir, la concentración en el seno del líquido. Cuando la partícula entra en contacto con la superficie del gas, la concentración de soluto se

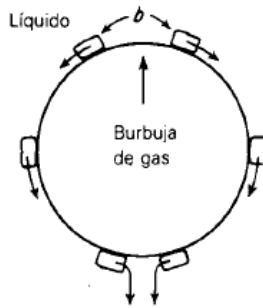


Figura 2-3.: Contacto entre una partícula de líquido y la burbuja de gas. Tomada de [57]

toma como la concentración de equilibrio entre el gas y el líquido, $C_{A,i}$. Durante el tiempo de contacto t , se da una difusión (penetración) del soluto desde la burbuja de gas hacia la partícula de líquido en la dirección vertical z_b (Ver Figura 2-4).

Los supuestos básicos de la Teoría de la penetración de Higbie son [33]:

- La transferencia de masa en estado transitorio ocurre siempre y cuando la partícula de líquido esté en contacto con la burbuja de gas.
- Existe un equilibrio en la interfaz gas-líquido.
- Cada partícula de líquido está en contacto con la burbuja de gas durante el mismo tiempo (todas las partículas de líquido se mueven a la misma velocidad).

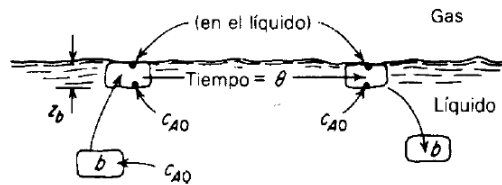


Figura 2-4.: Teoría de la penetración de Higbie. Tomada de [57].

Con base en las suposiciones presentadas en la Teoría de Higbie, se pueden despreciar los términos convectivos de la difusión, y así la transferencia de masa de gas-líquido se puede representar mediante la segunda ley de Fick [25]. En (2-29) se presenta la transferencia gas-líquido para la difusión en estado transitorio.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \quad (2-29)$$

donde C_A es la concentración del componente que se está transfiriendo en el líquido y D_L es la difusividad del gas en el líquido.

Las condiciones de frontera son:

- Si $t = 0, z > 0, C_A = C_{A,0}$
- Si $t > 0, z = 0, C_A = C_{A,i}$

Al resolver la ecuación diferencial parcial anterior, se obtiene:

$$\frac{C_{A,i} - C_A}{C_{A,i} - C_{A,0}} = \operatorname{erf}(x) \frac{z_b}{2\sqrt{D_L t}} \quad (2-30)$$

Donde, $\operatorname{erf}(x)$ es una función de error definida por:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z_b^2) dz \quad (2-31)$$

Si el proceso de transferencia de masa es unidireccional y la concentración en la superficie es muy pequeña ($C_{A,0} \approx 0$), la velocidad de transferencia del componente A , \dot{N}_A , se puede estimar por medio de (2-32).

$$\dot{N}_A = \frac{-\rho_L D_L}{1 - C_{A,0}} \left(\frac{\partial c_A}{\partial z} \right)_{z=0} = -\rho \left(\frac{\partial c}{\partial z} \right)_{z=0} \quad (2-32)$$

A partir de (2-30) y (2-32), la velocidad de transferencia de masa durante un tiempo t está dada por (2-33).

$$\dot{N}_A(t) = \sqrt{\frac{D_L}{\pi t}} (C_{A,i} - C_{A,0}) \quad (2-33)$$

De (2-33) se obtiene que el coeficiente de transferencia de masa está dado por:

$$k_L(t) = \sqrt{\frac{D_L}{\pi t}} \quad (2-34)$$

El coeficiente de transferencia de masa promedio durante el tiempo de contacto entre la partícula de líquido y el gas, t_c , se obtiene integrando (2-34):

$$\bar{k}_{L,av} = \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} k_L(t) dt = 2\sqrt{\frac{D_L}{\pi t_c}} \quad (2-35)$$

Partiendo de la definición del tiempo de contacto propuesto por [33], dicho tiempo se puede calcular mediante (2-36), donde d_b es el diámetro promedio de la burbuja, ϵ_G es la retención de gas (fracción de gas) y V_G es la velocidad del gas.

$$t_c = d_b \frac{\epsilon_G}{V_G} \quad (2-36)$$

■ Kawase et al. 1987

En [38], se propone una expresión teórica derivada de la teoría de la penetración de Higbie en la cual el tiempo de exposición del fluido a la transferencia de masa es determinado a partir de la escala de tiempo propuesta en la teoría de turbulencia isotrópica de Kolgomorov [41]. La ecuación teórica propuesta por los autores se presenta en (2-37).

$$k_L = 2\sqrt{\frac{D_L}{\pi}} \sqrt{\frac{V_G g}{\mu_L}} \quad (2-37)$$

donde μ_L es la viscosidad dinámica del líquido.

2.3.3. Retención de gas

Otro término importante y que ha sido ampliamente estudiado debido a su influencia en la transferencia de masa es la retención de gas (ϵ_G). Este término es afectado por otros parámetros implicados en la transferencia de masa como lo son el diámetro de la burbuja (d_b), que a su vez depende del diámetro del orificio del difusor (d_o), la tensión superficial (γ), la densidad del líquido (ρ_L) y la gravedad (g) [35]. De la misma manera que para el coeficiente de transferencia de masa, se han presentado diferentes estudios en donde se proponen expresiones empíricas que permiten determinar la retención de gas en sistemas aireados.

A continuación se presentan algunas de las correlaciones propuestas para la expresión de la retención del gas, [1] proponen en su estudio una correlación empírica para el coeficiente de transferencia de masa y una correlación para la retención de gas. Dicha ecuación se obtuvo mediante datos experimentales (Ver Ecuación (2-38)). En [31] presentan una correlación empírica tanto para el coeficiente de transferencia de masa como para la retención de gas. Esta última también la

proponen en términos de la velocidad superficial del gas y la temperatura, (Ver Ecuación (2-39)). Además, en [23] presentan una revisión acerca de los estudios en los que se han propuesto expresiones empíricas para determinar la retención de gas en sistemas aireados. En [23], el investigador realiza una comparación de las correlaciones propuestas obteniendo que la correlación propuesta por [43], (2-40), es la que mejor se ajusta a los datos experimentales, sin embargo la correlación propuesta por [36], (2-41), por ser menos compleja no requiere de métodos iterativos para su solución, además de tener un buen ajuste a los datos experimentales.

$$\frac{\epsilon_G}{(1 - \epsilon_G)^4} = 0,20 \left(\frac{gD_t^2 \rho_L}{\gamma} \right)^{1/8} \left(\frac{gD_t^3}{\nu_L^2} \right)^{1/12} \left(\frac{V_G}{\sqrt{gD_t}} \right) \quad (2-38)$$

$$\epsilon_G = -0,329266 + 0,023379V_G + 0,020305T + 0,000487V_G^2 - 0,000168T^2 - 0,00039V_GT \quad (2-39)$$

$$\frac{V_G}{\epsilon_G} + \frac{V_L}{1 - \epsilon_G} = \frac{3V_b(1 - \epsilon_G)(1 - \epsilon_G^{5/3})}{1 + (2 + 3\gamma/\mu_L)(1 - 0,628/\sqrt{Re})} \quad (2-40)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_G &= \frac{V_G}{31 + \beta(1 - e)\sqrt{V_G}} \\ \beta &= 4,5 - 3,5^{-0,064B^{1,3}} \\ e &= -0,18V_G^{1,8}/\beta \end{aligned} \quad (2-41)$$

2.3.4. Diámetro de burbuja

Como se ha presentado en este capítulo, tanto para el coeficiente de transferencia de masa como para la retención de gas, a lo largo de los años se han propuesto diferentes expresiones empíricas que permiten estimar el diámetro de burbuja promedio. En [16] se presenta un estudio en el que se realiza una comparación con respecto a tres expresiones matemáticas que permiten determinar el diámetro promedio de la burbuja. Los investigadores realizan mediciones del tamaño de las burbujas en dos columnas de burbujeo y un reactor de tanque agitado. Posteriormente, por medio de la ecuación del Diámetro promedio de Sauter, (2-42), determinan el valor promedio de las burbujas presentes en los tres equipos estudiados. Finalmente, el valor obtenido a partir de los datos experimentales es comparado con el arrojado por dos ecuaciones empíricas presentadas en [18] y [45], (2-43) y (2-44), respectivamente. En [16] mencionan que el diámetro promedio obtenido a partir de los datos experimentales y la ecuación propuesta en [52] con respecto a la correlación presentada en [18] tienen un error promedio de 26 % y con respecto a la correlación presentada en [45] tienen un error promedio de 15 %.

$$d_b = \frac{\sum n_i d_{bi}^3}{\sum n_i d_{bi}^2} \quad (2-42)$$

$$d_b = 4,15 \frac{\gamma^{3/5}}{\rho_L^{3/5} \left(\frac{P_g}{V_L}\right)^{2,5}} \epsilon_G^{1/2} + 0,0009 \quad (2-43)$$

$$d_b = 4,25 \frac{\gamma^{3/5}}{\rho_L^{3/5} \left(\frac{P_g}{V_L}\right)^{2,5}} \epsilon_G^{1/2} \quad (2-44)$$

donde V_L es el volumen del líquido y P_g es la potencia consumida en la aireación.

2.4. Planteamiento del problema

Debido a la gran importancia que tienen el oxígeno en el funcionamiento de sistemas aeróbicos, la transferencia de oxígeno desde las burbujas de aire al líquido, ha sido un fenómeno ampliamente estudiado a nivel mundial a través de los años. Una cantidad considerable de estos estudios, se centran en la recomendación de nuevas correlaciones empíricas que permiten determinar parámetros asociados a la ecuación de balance de masa presentada en (2-45), los cuales son el coeficiente de transferencia de masa, k_L , y el área específica de transferencias de masa, a . Dichas correlaciones empíricas provienen en su gran mayoría de análisis dimensionales, por lo cual finalmente son expresadas en términos de números adimensionales como Reynolds (Re), Froude (Fr), Deborah (De), entre otros [53], [3] [48]. Es importante mencionar que debido a la característica empírica de la mayoría de las ecuaciones que se han propuesto hasta el día de hoy, dichas ecuaciones no están basadas en el fenómenos de transferencia de oxígeno y están sujetas a las condiciones de operación bajo las cuales fueron obtenidas, haciendo que la ecuación no sean generalizables ni aplicable a otras condiciones de operación.

$$\frac{dC(t)}{dt} = k_L a (C_{O_2}^* - C_{O_2}(t)) \quad (2-45)$$

En (2-45), C es la concentración de oxígeno disuelto y C^* es la concentración de saturación de oxígeno disuelto en agua.

Es por lo anterior, que para la obtención de un modelo semifísico de base fenomenológica que describa adecuadamente la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida

en un proceso químico o bioquímico, es posible plantear una ecuación constitutiva de naturaleza fenomenológica que permita determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno considerando su característica dinámica, tal que el fenómeno de difusión entre fases (gas-líquido) sea más explicativo y se pueda aplicar a un amplio intervalo de condiciones operacionales. Lo anterior con el fin de poder controlar las dinámicas asociadas a procesos aeróbicos mediante estrategias de control basadas en modelo, donde dicho modelo debe ser una representación aceptable del sistema real, con el fin de poder predecir las respuestas posteriores del sistema mediante dicha formulación matemática.

2.5. Hipótesis

Para obtener un modelo semifísico de base fenomenológica que describa adecuadamente la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida en un proceso químico o bioquímico, es posible plantear una ecuación constitutiva de naturaleza fenomenológica que permita determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno considerando su característica dinámica, tal que el fenómeno de difusión entre fases (gas-líquido) sea más explicativo y se pueda aplicar a un amplio intervalo de condiciones operacionales.

2.6. Objetivos de la tesis

2.6.1. Objetivo general

Obtener una ecuación constitutiva que describa la dinámica del coeficiente volumétrico de transferencia de masa involucrado en la ecuación de balance de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida en un sistema aeróbico con aireación por difusión.

2.6.2. Objetivos específicos

1. Identificar los parámetros que tengan mayor efecto sobre la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida en sistemas con aireación por difusión.
2. Determinar la relación entre parámetros que tengan mayor efecto sobre la transferencia de masa, con el coeficiente de transferencia de masa mediante una ecuación dinámica.
3. Validar el desempeño del modelo de una planta para el tratamiento de aguas residuales haciendo uso de la ecuación constitutiva propuesta mediante datos experimentales obtenidos en una planta piloto bajo diferentes condiciones de operación.

2.7. Principal contribución

La principal contribución que se realiza en la presente tesis de maestría es la propuesta de un modelo semifísico de base fenomenológica, que describe el comportamiento dinámico de una planta piloto de aireación por difusión. Además, de la propuesta de una ecuación constitutiva para la obtención del coeficiente volumétrico de transferencia de masa ($k_L a$), basada en la teoría de la penetración de Higbie y un modelo hidrodinámico de formación de burbuja, que permite la separación del $k_L a$, caracterizando el coeficiente de transferencia de masa (k_L) y el área específica de transferencia de masa (a), que a su vez dependen de la retención de gas (ϵ) y el diámetro promedio de la burbuja (d_b).

3. Metodología

Partiendo de que la base de un problema de modelado que puede formularse a través de un algoritmo formal, Hangos y Cameron en el año 2001 y Álvarez et. al en los años 2009 y 2014, presentan una metodología para el desarrollo de un MSBF que consta de 10 pasos. A continuación se muestran los pasos del algoritmo propuestos por los autores, para una mayor comprensión e ilustración de este algoritmo el lector puede dirigirse a [4], [5] y [19].

- Paso 1: **construcción de la planta piloto, elaboración de una descripción verbal** y elaboración de un **diagrama de flujo de proceso** que se complementen. En este paso se realiza una descripción de forma escrita del objeto estudiado y sus características. En este paso se realiza una descripción detallada de las características que aporten al objetivo de modelado, resaltando las características más importantes.
- Paso 2: fijar un **nivel de detalle** para el modelo de acuerdo con su utilización. ¿Qué preguntas contestará el modelo? y postular una **hipótesis de modelado**. Para llevar a cabo este paso se requieren determinar los resultados que se esperan del modelo y las características del proceso, con el fin de determinar su finalidad. La hipótesis de modelado lo que busca es que en sistemas donde los fenómenos son poco conocidos se realice una o más abstracciones de los fenómenos que ocurren realmente, como si fueran fenómenos pre-establecidos y conocidos, que puedan vincularse a los reales pero con más simplicidad.
- Paso 3: definir tantos **sistemas de proceso (SdeP)** sobre el proceso que se modelará como los exija el nivel de detalle y representar la relación de todos los SdeP en un diagrama de bloques. Partiendo del análisis realizado en los anteriores pasos, se determinan los sistemas de proceso teniendo en cuenta las siguientes consideraciones: (i) Buscar separaciones físicas en el equipo de proceso. (ii) Buscar la existencia de diferentes fases en el equipo de proceso: líquido, gas, sólido, entre otras. (iii) Suponer límites arbitrarios cuando hay especial interés por una porción del proceso.
- Paso 4: aplicar el **principio de conservación** a cada uno de los SdeP. En este paso se plantea ecuaciones de balance para cada uno de los sistemas de proceso. En procesos químicos y bioquímicos las propiedades balanceables son: masa, energía térmica, cantidad de movimiento, entre otras.
- Paso 5: seleccionar de las **ecuaciones dinámicas de balance** aquellas con información valiosa para cumplir el objetivo de modelado. Este paso es de gran importancia para la obtención

de la estructura final del modelo. En esta etapa se seleccionan las ecuaciones de balance que permitan y aporten información para el objetivo de modelado.

- Paso 6: definir para las ecuaciones dinámicas de balance, los **parámetros**, las **variables** y las **constantes** conocidas en cada SdeP. Teniendo en cuenta los resultados esperados, en este paso se determinan las variables, los parámetros y las constantes, con el fin de determinar cuales variables debe predecir el modelo y cuales son externas por lo tanto se obtienen por otro medios como ecuaciones constitutivas.
- Paso 7: hallar **ecuaciones constitutivas** que permitan calcular el mayor número de parámetros en cada SdeP. En esta etapa del modelado se buscan expresiones matemáticas que permitan describir los parámetros asociados al modelo matemático.
- Paso 8: verificar los **grados de libertad** del modelo. $GL = \text{Número de ecuaciones} - \text{Número de incógnitas}$.
- Paso 9: obtener el **modelo computacional** o solución del modelo matemático. Teniendo en cuenta que las ecuaciones del modelo matemático son no ecuaciones diferenciales no lineales, se debe programar un método de solución adecuado.
- Paso 10: validar el modelo para diferentes condiciones y evaluar su desempeño. Para validar el modelo matemático se requiere resolver el modelo computacional y comparar su desempeño con datos experimentales tomados del proceso o con datos obtenidos en la literatura.

Los pasos 6, 7 y 10 darán cuenta del cumplimiento de los objetivos específicos. En el paso 6 se realiza una clasificación en parámetros, términos y constantes, que permite determinar cuáles son los parámetros que necesitan ser identificados o hallados mediante ecuaciones constitutivas y cuáles son fijados por el modelador, todo esto teniendo en cuenta cual es el objetivo del modelo. En el paso 7, se obtienen ecuaciones constitutivas (expresiones matemáticas) que permiten determinar el mayor número de parámetros, en este paso se recurre al conocimiento acerca de cinéticas de reacciones químicas, descripción de fenómenos de transporte, equilibrios entre fases, entre otros. Además, se complementa con expresiones empíricas, datos de operación o conocimientos previos sobre el proceso. Finalmente, en el paso 10, se realiza la validación del modelo matemático al solucionar este bajo diversas condiciones, empleando diferentes ecuaciones constitutivas, con el fin de evaluar el desempeño de dicho modelo y su porcentaje de error con respecto a datos experimentales.

4. Resultados y Discusión

A partir de la metodología de modelado presentada en el Capítulo 3, se desarrolló un MSBF para una planta piloto aireada por difusión. A continuación se detallan los pasos del algoritmo y los resultados obtenidos, teniendo en cuenta los objetivos planteados en la Sección 2.6.

4.1. Construcción, descripción verbal de la planta piloto y diagrama de flujo de proceso

4.1.1. Descripción verbal

En la Figura 4-1 (b) se presenta el diagrama de instrumentación y tuberías de la planta piloto real que se muestra en la Figura 4-1 (a). La planta piloto presentada está compuesta por un tanque aireado alimentado por una corriente de aire comprimido que entra al reactor por medio de un difusor. El aire asciende a través del tanque en forma de burbujas, permitiendo tanto la transferencia de oxígeno desde la fase gaseosa a la fase líquida como la homogenización del medio. Dicho fenómeno de transferencia de oxígeno es influenciado por diferentes parámetros como son las condiciones de operación del proceso, temperatura y nivel, y los diferentes parámetros hidrodinámicos que tienen lugar allí, densidad, viscosidad y régimen de flujo, influencia que se refleja en el coeficiente de transferencia de masa. Con el fin de emular el consumo de oxígeno por parte de los microorganismos, se agrega metabisulfito de sodio al tanque de proceso, ya que este es un compuesto químico que se encarga de “secuestrar” el oxígeno disuelto en el agua. Por la parte superior del tanque de proceso se libera al ambiente el aire carente de oxígeno. La corriente líquida que sale del tanque de proceso se alimenta a un tanque auxiliar desde el cual dicho fluido es bombeado hacia un intercambiador de calor que se encarga de elevar la temperatura de la corriente de líquido y es accionado por medio de un relé, esto con el fin de evaluar como se comporta la transferencia de oxígeno desde una fase gaseosa a una fase líquida a diferentes temperaturas. El fluido calentado se alimenta de nuevo al tanque aireado, cerrando el circuito de flujo del líquido en la planta piloto.

4.1.2. Montaje experimental

Con respecto a los datos experimentales, se realizó medición de tres variables del proceso las cuales son: Temperatura (T_3), nivel del líquido (L_{II}) y concentración de oxígeno disuelto ($C_{O_2,2}$)

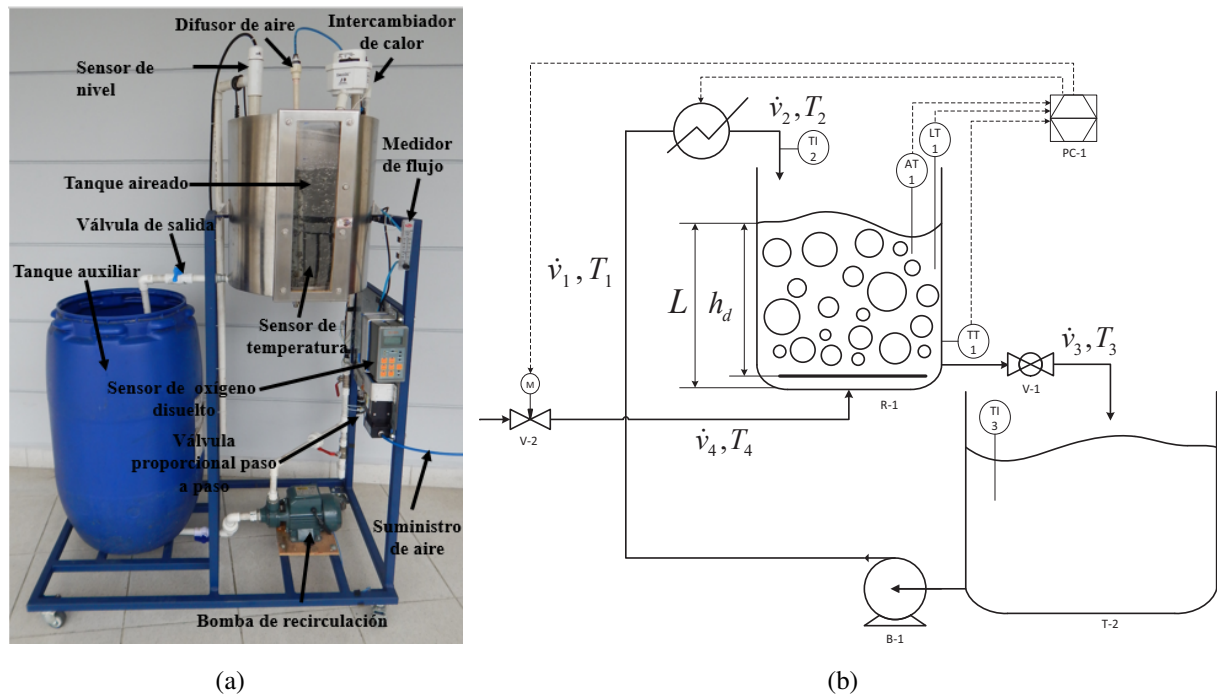


Figura 4-1.: Planta piloto aireada por difusión.

en el tanque reactor. La medición de estas variables se realizó por medio de tres dispositivos de medición (Ver Figura 4-1 (a)), un sensor Omnigrad M TR11 de Endrees+Hauser[®], el cual tiene un rango de medición de -200 a $600^{\circ}C$, con una exactitud de $\pm 0,08\%$, una sonda hidrostática Waterpilot FMX21 de Endress+Hauser[®] con un rango de medición de 0 a $20\ m\ H_2O$, con una exactitud de $\pm 0,2\%$ y un electrodo galvánico en línea HI8410 de Hanna Instruments[®], el cual realiza mediciones en un rango de 0 a $50\ mg/L$ con $\pm 1\%$ de exactitud. Los datos fueron adquiridos usando una tarjeta de adquisición de datos de National Instruments[®] NI USB-6343 con un tiempo de muestreo de $1\ s$. Finalmente, las señales fueron procesadas usando LabVIEW 2015 de National Instruments[®]. El medidor de flujo empleado fue RMA-TMV de 2 pulgadas de Dwyer[®], con un rango de medición de 5 a $50\ L/min$ y $\pm 4\%$ de precisión. Para la regulación del flujo de aire entrando al tanque aireado se utilizó una válvula con un motor paso a paso, SMV20A de Aalborg[®], con un rango de flujo de 0 a $200\ L/min$ y una resolución para el motor paso a paso de $0,000125^{\circ}/step$. La unidad de intercambio de calor es un cabezal de ducha eléctrica de baño Kontiki[®] la cual consume $5,5\ KW$ de potencia eléctrica. El relé usado para el accionamiento del intercambiador de calor es un SSR TD48A90 de OPTEC con un rango de salida de 24 a $575\ V\ AC$ y $90\ A$, y un rango de señal de control de entrada de 4 a $32\ V\ DC$. La bomba de recirculación es una QB60 STANPROF de $1/2\ HP$ a $3450\ rpm$ y un flujo máximo de $35\ L/min$ y una cabeza máxima de $35\ m$.

4.1.3. Diseño del difusor de aire

Debido a que en la tesis que se presenta se busca estudiar la transferencia de oxígeno a partir de aire comprimido inyectado al reactor, se realizó el diseño de un difusor teniendo en cuenta su geometría y tamaño de orificio. El diseño del difusor se realizó siguiendo las metodologías descritas en [44] y [7]. Para el material de construcción del difusor se eligió tubería de cloruro de polivinilo clorado (CPVC) y una geometría cuadrada, presentado en la Figura 4-2. Los parámetros de diseño obtenidos a partir de la metodologías empleadas se presentan en la Tabla 4-1.

Tabla 4-1.: Parámetros de diseño del difusor.

Parámetro de diseño	Valor
d_T	0,011 m
L_d	0,655 m
d_0	1,028 mm
c	57
$Q_{a,n}$	$5,83 \times 10^{-4} m^3/s$
P_0	20 psig

donde d_T es el diámetro de la tubería del difusor, L_d es la longitud de tubería recorrida por el aire dentro del difusor, d_0 es el diámetro del orificio, $Q_{a,n}$ es el caudal nominal de aire comprimido que ingresa al difusor y P_0 es la presión de entrada al difusor.

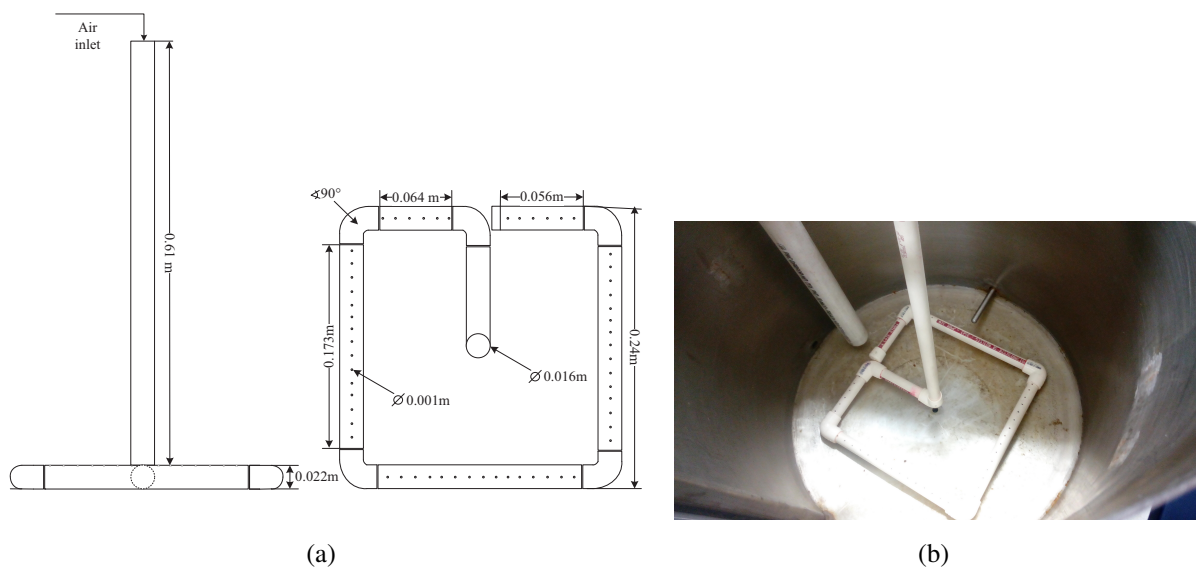


Figura 4-2.: Difusor de aire, diseño e instalación.

4.2. Nivel de Detalle, Qué Preguntas Contestará el Modelo?, Hipótesis de Modelado

4.2.1. Nivel del detalle

El comportamiento de aireadores, es usualmente descrito por medio de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales (PDEs) que explican el fenómeno en las diferentes escalas. Sin embargo, a pesar de la precisión de dichos modelos, no son comunmente usados para tareas de control principalmente por el costo computacional para su solución [10]. Por lo tanto, el modelo que se presenta en este documento y que describe el comportamiento de una planta piloto aireada por difusión, es a escala macroscópica de parámetros concentrados, adecuado para tareas orientadas al control de procesos.

4.2.2. ¿Qué pregunta contestará el modelo?

Teniendo en cuenta el objeto real y realizando un análisis de éste, la pregunta que responderá el modelo es: Cómo puede describirse la transferencia de masa desde la fase gaseosa a la fase líquida en un proceso de aireación por difusión? En el desarrollo del modelo matemático se busca una mejor representación del cambio del oxígeno disuelto en el tiempo, teniendo en cuenta las variables y los parámetros que tienen mayor influencia sobre la transferencia de masa.

4.2.3. Hipótesis de Modelado

La aireación por difusión se caracteriza por la formación de burbujas de aire dentro del medio líquido debido a la presencia de difusores. La transferencia de oxígeno desde la fase gaseosa a la fase líquida se ve favorecida por el tamaño de burbuja, entre mayor cantidad de burbujas pequeñas se encuentren en el proceso mayor transferencia de oxígeno se puede obtener. Lo anterior se debe a que el área superficial total de una gran cantidad de burbujas pequeñas es mayor que el área superficial total de poca cantidad de burbujas grandes, lo cual disminuye el área específica de transferencia de masa y de esta misma forma se disminuye la eficiencia en la transferencia de oxígeno.

Para simular el consumo de oxígeno disuelto en agua por parte de los microorganismos presentes en los lodos activados, se añadió un agente químico secuestrante de oxígeno (metabisulfito de sodio) que permite simular la perturbación que se presenta en sistema de procesos bioquímicos cuando los microorganismos presentes en ella se encargan de consumirlo. En sistemas de procesos industriales donde el consumo de oxígeno se da por medio de microorganismos, se debe incluir en el modelo los términos que dan cuenta del consumo de oxígeno, del crecimiento del microorganismo o consorcio de microorganismos y el cambio de viscosidad del medio. La inclusión de dichos términos al modelo matemático deben permitirle predecir de forma adecuada la concentración de oxígeno

disuelto en el medio ya que el modelo parte de primeros principios (balances generales de masa y energía).

Las limitaciones y suposiciones del modelo son:

- Se asume que las burbujas son esféricas y no cambian de tamaño a medida que ascienden en el tanque, primero debido a que la altura no permite un cambio significativo en el tamaño de estas y segundo el régimen de flujo en el que opera el tanque aireado se considera homogéneo.
- La geometría del tanque aireado se asume cilíndrica. Sin embargo, el modelo puede extenderse a otras geometrías usando un diámetro equivalente.
- Se asume mezcla perfecta en el tanque sin variación espacial de concentración de oxígeno y secuestrante de oxígeno. Para este caso, la aireación se encarga de mezclar los reactivos en el medio. Sin embargo, esta suposición podría no ser válida para aireadores a gran escala con difusores de burbuja fina, donde se requerirá de un mezclador.
- La válvula de salida del tanque de proceso tiene dos características de flujo, lineal e isopercentual, dependientes de la fracción de apertura.
- La temperatura del fluido a la salida del tanque auxiliar es igual a la temperatura del fluido que entra en el intercambiador de calor (ducha). Es decir, no hay pérdidas de calor en la tubería.
- No hay pérdidas de energía por fricción en la tubería que conecta el tanque auxiliar con el tanque aireado. Por lo tanto, la velocidad de flujo a la salida del tanque auxiliar es aproximadamente igual a la velocidad de flujo a la entrada del intercambiador de calor.
- La transferencia de masa debido al contacto de la superficie del agua con el aire atmosféricos es despreciable. Esta suposición puede no ser válida para aireadores a gran escala, ya que la razón radio-altura del tanque de aireación es pequeña comparada con tanques aireados a gran escala, en los cuales la transferencia de oxígeno desde el aire atmosférico a la superficie del agua en el tanque aireador, podría tener una gran contribución en la transferencia de masa.
- Dado un punto de operación en el tanque aireado, se considera que el nivel del tanque no cambia cuando es aireado, es decir, las fluctuaciones debido a la aireación son ignoradas.
- En el intercambiador de calor no se consideran cambios en el volumen, la concentración de oxígeno disuelto y la concentración de secuestrante de oxígeno.
- Las propiedades físicas del fluido permanecen constantes.

- Los efectos de la temperatura en la cinética de reacción no son incluidos en el modelo, lo anterior debido a que no se cuenta con los elementos de medición necesarios para evaluar la concentración de secuestrante de oxígeno en el tiempo bajo diversas condiciones. Además, en el sistema no se presentan grandes cambios de temperatura que puedan afectar en gran medida las cinéticas de reacción. En sistemas donde se presenten grandes cambios de temperatura, esta suposición puede no ser válida y se deben incluir dichos efectos en el modelo matemático.
- La distribución diámetro de la burbuja es aproximada usando el diámetro promedio de burbujas. Los fenómenos de coalescencia y rompimiento de burbujas no son considerados.

4.3. Sistemas de proceso y Diagrama de Flujo en Bloques de los sistemas de proceso

Para la obtención del modelo semifísico de base fenomenológica de la planta piloto de aireación por difusión, se realizó la partición del proceso en sistemas de proceso (*SdeP*) (Ver Figura 4-3). Los sistemas de proceso fueron definidos teniendo en cuenta particiones físicas y diferencia de fases en el proceso (gas/líquido). En la Figura 4-3 las flechas delgadas (\rightarrow) representan flujos másicos y volumétricos, las flechas gruesas (\Rightarrow) representan los flujos de energía, las corrientes numeradas con 1, 2, 3 y 4 representan flujos de masa, \dot{Q}_1 representa el flujo de energía desde la resistencia eléctrica al fluido de proceso en el intercambiador de calor y \dot{Q}_I , \dot{Q}_{II} y \dot{Q}_{III} , representan las pérdidas de calor al ambiente por convección natural.

Para la ducha se define un sistema de proceso llamado fluido de proceso en el intercambiador de calor (*SdeP_I*) que recibe energía desde la resistencia eléctrica. La partición de este proceso se realizó teniendo en cuenta que la resistencia presente en la ducha le transfiere calor al líquido, logrando elevar la temperatura. Para el tanque aireado se define un sistema de proceso llamado volumen de líquido contenido en el tanque aireado (*SdeP_{II}*). Finalmente, se tiene en cuenta un tercer sistema de proceso llamado tanque auxiliar (*SdeP_{III}*).

- *SdeP_I*: fluido de proceso en el intercambiador de calor.
- *SdeP_{II}*: volumen de líquido contenido en el tanque aireado.
- *SdeP_{III}*: tanque auxiliar.

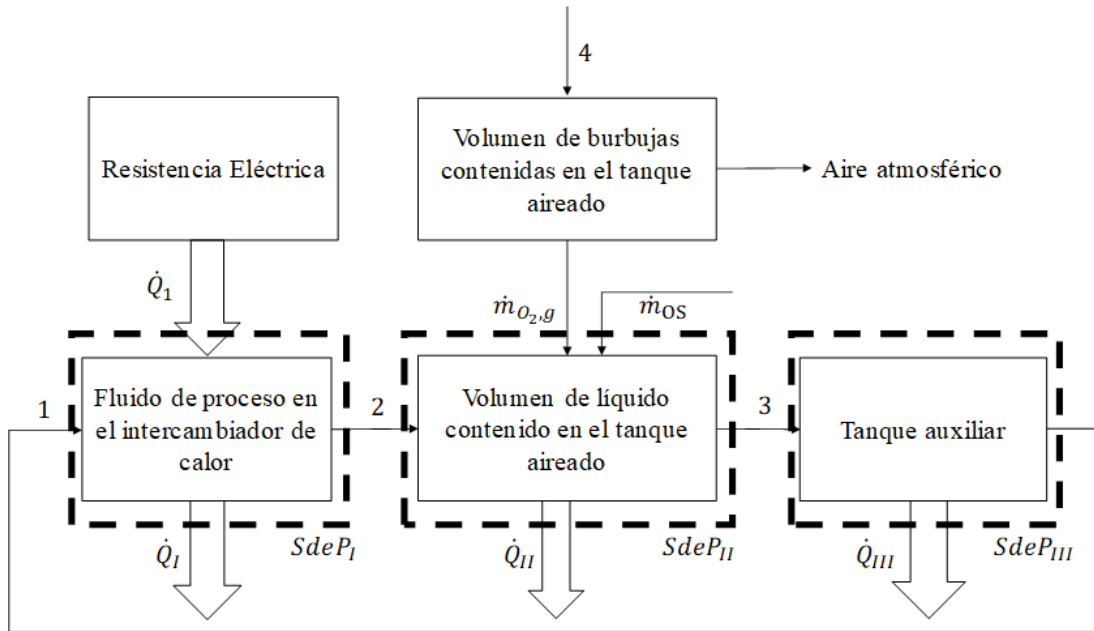


Figura 4-3.: Diagrama de bloques de los sistemas de proceso.

4.4. Aplicación del principio de conservación a cada uno de los sistemas de proceso

4.4.1. $SdeP_I$: fluido de proceso en el intercambiador de calor

Balance de materia total

$$\left. \frac{dM_I}{dt} \right|_{SdeP_I} = \dot{m}_1 - \dot{m}_2 \quad (4-1)$$

$$\dot{m}_i = \rho_L \dot{v}_i, \quad i = 1, 2 \quad (4-2)$$

$$M_I = \rho_L V_I \quad (4-3)$$

donde M_I es la masa total acumulada en el $SdeP_I$, \dot{m}_1 es el flujo másico de entrada al $SdeP_I$, \dot{m}_2 es el flujo másico de salida del $SdeP_I$, ρ_L es la densidad del fluido, \dot{v}_1 es el flujo volumétrico de entrada del $SdeP_I$, \dot{v}_2 es el flujo volumétrico de salida del $SdeP_I$ y V_I es el volumen de líquido en el sistema de proceso I. Teniendo en cuenta que el volumen del $SdeP_I$ es suficientemente pequeño comparado con el volumen de otras unidades, se asume que no hay acumulación en el sistema de proceso, $\frac{dV_I}{dt} = 0$. Por lo tanto, de (4-1) se tiene:

$$\frac{dV_I}{dt} = \dot{v}_1 - \dot{v}_2 \quad (4-4)$$

$$\dot{v}_1 = \dot{v}_2 \quad (4-5)$$

Balance másico de oxígeno disuelto

$$\left. \frac{dM_{O_2,2}}{dt} \right|_{SdeP_I} = \dot{m}_{O_2,1} - \dot{m}_{O_2,2} \quad (4-6)$$

$$M_{O_2,2} = C_{O_2,2} V_I \quad (4-7)$$

$$\dot{m}_{O_2,i} = \dot{v}_i C_{O_2,i}, \quad i = 1, 2 \quad (4-8)$$

$$V_I \frac{dC_{O_2,2}}{dt} = (\dot{v}_1 C_{O_2,1} - \dot{v}_2 C_{O_2,2}) \quad (4-9)$$

donde $M_{O_2,2}$ es la masa de oxígeno disuelto en el $SdeP_I$, $\dot{m}_{O_2,1}$ es el flujo másico de oxígeno que entra al $SdeP_I$, $\dot{m}_{O_2,2}$ es el flujo másico de oxígeno que sale del $SdeP_I$, $C_{O_2,1}$ es la concentración de oxígeno en la corriente de entrada al $SdeP_I$ y $C_{O_2,2}$ es la concentración de oxígeno en la corriente de salida del $SdeP_I$.

Considerando (4-5) y que $\frac{dC_{O_2,2}}{dt} = 0$, entonces:

$$C_{O_2,1} = C_{O_2,2} \quad (4-10)$$

Por lo tanto, a partir de (4-10), se puede concluir que no hay variación considerable en la concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_I$.

Balance molar de secuestrante de oxígeno

$$\left. \frac{dN_{OS,2}}{dt} \right|_{SdeP_I} = \dot{n}_{OS,1} - \dot{n}_{OS,2} \quad (4-11)$$

$$N_{OS,2} = V_I C_{OS,2} \quad (4-12)$$

$$\dot{n}_{OS,i} = \dot{v}_i C_{OS,i}, \quad i = 1, 2 \quad (4-13)$$

$$V_I \frac{dC_{OS,2}}{dt} = \dot{v}_2 (C_{OS,1} - C_{OS,2}) \quad (4-14)$$

donde $N_{OS,2}$ son las moles totales de secuestrante de oxígeno en el $SdeP_I$, $\dot{n}_{OS,1}$ es velocidad del flujo molar de secuestrante de oxígeno que entra al $SdeP_I$, $\dot{n}_{OS,2}$ es la velocidad del flujo molar de secuestrante de oxígeno que sale del $SdeP_I$, $C_{OS,1}$ es la concentración de secuestrante de oxígeno en la corriente de entrada al $SdeP_I$ y $C_{OS,2}$ es la concentración de secuestrante de oxígeno en la corriente de salida del $SdeP_I$.

Considerando (4-5) y que $\frac{dC_{OS,2}}{dt} = 0$, entonces:

$$C_{OS,1} = C_{OS,2} \quad (4-15)$$

Por lo tanto, a partir de (4-15) puede considerarse que no hay cambios significativos en la concentración de secuestrante de oxígeno en el $SdeP_I$.

Balance de energía total

$$\left. \frac{dH_I}{dt} \right|_{SdeP_I} = \dot{m}_1 \hat{H}_1 - \dot{m}_2 \hat{H}_2 + \dot{Q}_1 - \dot{Q}_I \quad (4-16)$$

$$H_I = M_I C_P T_2 \quad (4-17)$$

$$\hat{H}_j = C_P T_j, \quad j = 1, 2 \quad (4-18)$$

donde H_I es la entalpía del $SdeP_I$, \hat{H}_j con $j = 1, 2$ es la entalpía específica de la corriente j , C_P es la capacidad calorífica del líquido, \dot{Q}_1 es la velocidad de calor transferido desde la resistencia eléctrica al fluido de proceso en el intercambiador de calor, \dot{Q}_I es la tasa de calor perdido al ambiente por convección natural y T_1 y T_2 son las temperaturas de las corrientes de entrada y salida del $SdeP_I$, respectivamente.

Empleando (4-2), (4-3) y (4-5), el balance de energía puede escribirse de la forma:

$$\frac{dT_2}{dt} = \frac{\dot{v}_2}{V_I} (T_1 - T_2) + \frac{\dot{Q}_1 - \dot{Q}_I}{C_P \rho_L V_I} \quad (4-19)$$

4.4.2. $SdeP_{II}$: volumen de líquido contenido en el tanque aireado

Balance total de masa

$$\left. \frac{dM_{II}}{dt} \right|_{SdeP_{II}} = \dot{m}_2 - \dot{m}_3 \quad (4-20)$$

$$M_{II} = \rho_L V_{II} = \rho_L A_{T_{II}} L_{II} \quad (4-21)$$

donde M_{II} y V_{II} son la masa total y el volumen de líquido en el $SdeP_{II}$, respectivamente, \dot{m}_3 es el flujo másico saliendo del tanque aireado, $A_{T_{II}}$ es el área de la sección transversal del tanque aireado y L_{II} es el nivel del líquido en el tanque aireado. Empleando (4-2) y resolviendo para L_{II} , la ecuación anterior queda como:

$$A_{TII} \rho_L \frac{dL_{II}}{dt} = \rho_L \dot{v}_2 - \rho_L \dot{v}_3 \quad (4-22)$$

Por lo tanto, la dinámica del nivel en el tanque aireado es:

$$\frac{dL_{II}}{dt} = \frac{1}{A_{TII}} (\dot{v}_2 - \dot{v}_3) \quad (4-23)$$

$$(4-24)$$

donde \dot{v}_3 es el flujo volumétrico de salida del *SdeP_{II}*.

Balance másico de oxígeno disuelto

$$\left. \frac{dM_{O_2,3}}{dt} \right|_{SdeP_{II}} = \dot{m}_{O_2,2} - \dot{m}_{O_2,3} + \dot{m}_{O_2,g} - \dot{r}_{O_2,II} \quad (4-25)$$

$$M_{O_2,3} = C_{O_2,3} V_{II} = C_{O_2,3} A_{TII} L_{II} \quad (4-26)$$

$$\dot{m}_{O_2,g} = k_L a V_{II} (C_{O_2}^* - C_{O_2,3}) = k_L a L_{II} A_{TII} (C_{O_2}^* - C_{O_2,3}) \quad (4-27)$$

donde $M_{O_2,3}$ es la masa de oxígeno en el *SdeP_{II}*, $\dot{r}_{O_2,II}$ es la velocidad de consumo de oxígeno debido a la acción del secuestrante en el *SdeP_{II}*, $\dot{m}_{O_2,g}$ es la velocidad de transferencia de masa desde la fase gaseosa a la fase líquida, $\dot{m}_{O_2,3}$ es el flujo másico de oxígeno disuelto que sale del *SdeP_{II}*, $k_L a$ es el coeficiente volumétrico de transferencia de oxígeno, $C_{O_2}^*$ es concentración de equilibrio de oxígeno disuelto en el líquido, el cual es equivalente a la solubilidad del oxígeno en agua. Empleando (4-8), se obtiene (4-28), que es el balance másico de oxígeno disuelto en el *SdeP_{II}*.

$$\begin{aligned} \frac{dC_{O_2,3}}{dt} = & \frac{1}{A_{TII} L_{II}} (\dot{v}_2 C_{O_2,2} - \dot{v}_3 C_{O_2,3}) + k_L a (C_{O_2}^* - C_{O_2,3}) - \dots \\ & \dots - \dot{r}_{O_2,II} - \frac{C_{O_2,3}}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \end{aligned} \quad (4-28)$$

donde $C_{O_2,3}$ es la concentración molar de secuestrante de oxígeno en la corriente de salida del tanque aireado (*SdeP_{II}*).

Balance molar de secuestrante de oxígeno

$$\left. \frac{dN_{OS,3}}{dt} \right|_{SdeP_{II}} = \frac{\dot{m}_{OS}}{M_{OS}} + \dot{n}_{OS,2} - \dot{n}_{OS,3} - \dot{r}_{OS,II} \quad (4-29)$$

$$N_{OS,3} = V_{II} C_{OS,3} = A_{TII} L_{II} C_{OS,3} \quad (4-30)$$

donde $N_{OS,3}$ es el número de moles acumuladas en el $SdeP_{II}$, $\dot{r}_{OS,II}$ es velocidad de consumo del secuestrante de oxígeno, $\dot{n}_{OS,3}$ es el flujo molar de secuestrante de oxígeno a la salida del $SdeP_{II}$, \dot{m}_{OS} es la velocidad de flujo del secuestrante de oxígeno adicionado al $SdeP_{II}$ y M_{OS} es el peso molecular del secuestrante de oxígeno. Usando (4-13), el balance de secuestrante de oxígeno en el $SdeP_{II}$ es:

$$\frac{dC_{OS,3}}{dt} = \frac{1}{A_{II}L_{II}} \left(\frac{\dot{m}_{OS}}{M_{OS}} + \dot{v}_2 C_{OS,2} - \dot{v}_3 C_{OS,3} \right) - \dot{r}_{OS,II} - \frac{C_{OS,3}}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \quad (4-31)$$

donde $C_{OS,3}$ es la concentración de secuestrante de oxígeno en la corriente de salida del tanque aireado.

Balance de energía total

$$\frac{dH_{II}}{dt} \Big|_{SdeP_{II}} = \dot{m}_2 \hat{H}_2 - \dot{m}_3 \hat{H}_3 - \dot{Q}_{II} \quad (4-32)$$

$$H_{II} = M_{II} C_P T_3 = \rho_L V_{II} C_P T_3 = \rho_L A_{T_{II}} L_{II} C_P T_3 \quad (4-33)$$

donde H_{II} es la entalpía del $SdeP_{II}$, \hat{H}_2 y \hat{H}_3 son las entalpías específicas de las corrientes de entrada y salida del $SdeP_{II}$, respectivamente, T_3 es la temperatura de la corriente de salida del tanque aireado, \dot{Q}_{II} es la velocidad de calor perdido al ambiente por convección natural en el $SdeP_{II}$. Usando (4-2) y (4-18), el balance de energía total queda:

$$\frac{dT_3}{dt} = \frac{1}{A_{T_{II}} L_{II}} (\dot{v}_2 T_2 - \dot{v}_3 T_3) - \frac{\dot{Q}_{II}}{C_P \rho_L L_{II} A_{T_{II}}} - \frac{T_3}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \quad (4-34)$$

4.4.3. $SdeP_{III}$: tanque auxiliar

Balance de materia total

$$\frac{dM_{III}}{dt} \Big|_{SdeP_{III}} = \dot{m}_3 - \dot{m}_1 \quad (4-35)$$

$$M_{III} = \rho_L V_{III} = \rho_L A_{T_{III}} L_{III} \quad (4-36)$$

donde M_{III} es la masa total en el $SdeP_{III}$, V_{III} es el volumen de líquido en el $SdeP_{III}$, \dot{m}_1 es el flujo másico a la salida del tanque auxiliar, $A_{T_{III}}$ es el área de la sección transversal del tanque auxiliar y L_{III} es el nivel del líquido en el tanque auxiliar. Empleando la (4-2) y resolviendo para L_{III} , la ecuación de balance final es:

$$\frac{dL_{III}}{dt} = \frac{1}{A_{T_{III}}} (\dot{v}_3 - \dot{v}_1) \quad (4-37)$$

donde \dot{v}_1 es el flujo volumétrico a la salida del tanque auxiliar.

Balance másico de oxígeno disuelto

$$\left. \frac{dM_{O_2,1}}{dt} \right|_{SdeP_{III}} = \dot{m}_{O_2,3} - \dot{m}_{O_2,1} - \dot{r}_{O_2,III} \quad (4-38)$$

$$M_{O_2,1} = C_{O_2,1} V_{III} = C_{O_2,1} A_{T_{III}} L_{III} \quad (4-39)$$

donde $M_{O_2,1}$ es el masa total de oxígeno en el $SdeP_{III}$, $\dot{r}_{O_2,III}$ es la velocidad de consumo de oxígeno debido a la acción del secuestrante de oxígeno en el tanque auxiliar, $\dot{m}_{O_2,1}$ es el flujo másico de oxígeno a la salida del tanque auxiliar y $C_{O_2,1}$ es el concentración de oxígeno disuelto en la corriente de salida del $SdeP_{III}$. Empleando (4-8), el balance de oxígeno disuelto es:

$$\frac{dC_{O_2,1}}{dt} = \frac{1}{A_{T_{III}} L_{III}} (\dot{v}_3 C_{O_2,3} - \dot{v}_1 C_{O_2,1}) - \dot{r}_{O_2,III} - \frac{C_{O_2,1}}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \quad (4-40)$$

Balance molar de secuestrante de oxígeno

$$\left. \frac{dN_{OS,1}}{dt} \right|_{SdeP_{III}} = \dot{n}_{OS,3} - \dot{n}_{OS,1} - \dot{r}_{OS,III} \quad (4-41)$$

$$N_{OS,1} = V_{III} C_{OS,1} = A_{T_{III}} L_{III} C_{OS,1} \quad (4-42)$$

donde $\dot{r}_{OS,III}$ es la velocidad de consumo molar del secuestrante de oxígeno en el $SdeP_{III}$ y $N_{OS,1}$ son las moles de secuestrante de oxígeno acumuladas en el $SdeP_{III}$. Empleando (4-13), (4-41) se puede escribir como:

$$\frac{dC_{OS,1}}{dt} = \frac{1}{A_{T_{III}} L_{III}} (\dot{v}_3 C_{OS,3} - \dot{v}_1 C_{OS,1}) - \dot{r}_{OS,III} - \frac{C_{OS,1}}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \quad (4-43)$$

Balance de energía total

$$\left. \frac{dH_{III}}{dt} \right|_{SdeP_{III}} = \dot{m}_3 \hat{H}_3 - \dot{m}_1 \hat{H}_1 - \dot{Q}_{III} \quad (4-44)$$

$$H_{III} = M_{III} C_P T_1 = \rho_L V_{III} C_P T_1 = \rho_L A_{T_{III}} L_{III} C_P T_1 \quad (4-45)$$

donde H_{III} es la entalpía del $SdeP_{III}$, \hat{H}_3 es la entalpía específica en la corriente de entrada al tanque auxiliar, \hat{H}_1 es la entalpía específica de la corriente de salida del $SdeP_{III}$, T_1 es la temperatura en la corriente de salida del tanque auxiliar y \dot{Q}_{III} es la velocidad de calor perdido al ambiente debido a la convección natural en el $SdeP_{III}$. Considerando las ecuaciones (4-2) y (4-18), el balance de energía total en el tanque auxiliar puede expresarse como:

$$\frac{dT_1}{dt} = \frac{1}{A_{T_{III}} L_{III}} (\dot{v}_3 T_3 - \dot{v}_1 T_1) - \frac{\dot{Q}_{III}}{C_P \rho_L L_{III} A_{T_{III}}} - \frac{T_1}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \quad (4-46)$$

4.5. Ecuaciones dinámicas de balance del modelo

Teniendo en cuenta el objetivo de modelado y que el modelo está orientado a tareas de control, las ecuaciones dinámicas de balance que brindan información útil sobre el comportamiento de la planta piloto de aireación por difusión son: (4-5), (4-10), (4-15), (4-19), (4-23), (4-28), (4-31), (4-34), (4-37), (4-40), (4-43) y (4-46).

4.6. Clasificación en parámetros, constantes y variables

Las variables (V), parámetros (P) y constantes (C), usados en el modelo semifísico de base fenomenológica para una planta piloto aireada por difusión se presentan en la Tabla 4-2.

Tabla 4-2.: Clasificación en variables, parámetros y constantes.

Símbolo	Tipo	Unidades	Símbolo	Tipo	Unidades
L_{II}	V	m	\dot{Q}_I	P	W
L_{III}	V	m	\dot{Q}_{II}	P	W
$C_{O_2,1}$	V	kg/m^3	\dot{Q}_{III}	P	W
$C_{O_2,2}$	V	kg/m^3	k_L	P	m/s
$C_{O_2,3}$	V	kg/m^3	a	P	m^{-1}
$C_{OS,1}$	V	$kmol/m^3$	$C_{O_2}^*$	P	kg/m^3
$C_{OS,2}$	V	$kmol/m^3$	k_{OS}	P	$(Kmol/m^3)^{1-z}/s$
$C_{OS,3}$	V	$kmol/m^3$	k_S	P	$Kmol/m^3/s$
T_1	V	K	z_o	P	\square
T_2	V	K	\dot{m}_{OS}	P	kg/m^3
T_3	V	K	$A_{T_{II}}$	C	m^2
\dot{v}_1	P	m^3/s	$A_{T_{III}}$	C	m^2
\dot{v}_2	P	m^3/s	C_P	C	m/s
\dot{v}_3	P	m^3/s	ρ_L	C	kg/m^3
V_I	P	m^3	M_{OD}	C	g/mol
\dot{Q}_1	P	W	M_{OS}	C	g/mol

4.7. Ecuaciones constitutivas

En este paso de la metodología de modelado, deben buscarse ecuaciones que permitan determinar la mayor cantidad de parámetros presentes en el modelo.

4.7.1. Coeficiente de transferencia de masa

Para determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa, se emplean (2-35) y (2-36), presentadas en la Sección 2.3.2, formuladas a partir de la teoría de la penetración de [33]. Además, como se puede observar dicha ecuación no tiene en cuenta el área específica de transferencia de masa, por lo tanto se propone separar el $k_L a$ en el coeficiente de transferencia de masa k_L y el área específica de transferencia de masa a , de tal forma que $k_L a = k_L \cdot a$. Lo anterior se realizó con el fin de obtener un modelo matemático que sea más descriptivo y se obtengan resultados que representen mejor los datos experimentales.

$$k_L = 2\sqrt{\frac{D_L}{\pi t_c}} \quad t_c = d_b \frac{\epsilon_G}{V_G}$$

$$V_G = \frac{\dot{v}_4}{A_{TII}} \quad (4-47)$$

donde \dot{v}_4 es el flujo volumétrico de gas que entra al $SdeP_{II}$ y depende de la fracción de apertura (u_b) de la válvula paso a paso que regula el flujo de aire.

$$\dot{v}_4 = \dot{v}_{4,max} u_b \quad (4-48)$$

4.7.2. Diámetro promedio de burbuja

Para determinar el diámetro de burbuja promedio se partió del modelo de formación de burbuja presentado por [63] y [59]. De acuerdo con los investigadores, la formación de una burbuja se presenta en dos etapas, la primera etapa de crecimiento (Figura 4-4 (a)) y la segunda etapa de desprendimiento (Figura 4-4 (b)). Ambas etapas se formulan mediante un balance de fuerza aplicado sobre la burbuja y se definen a continuación.

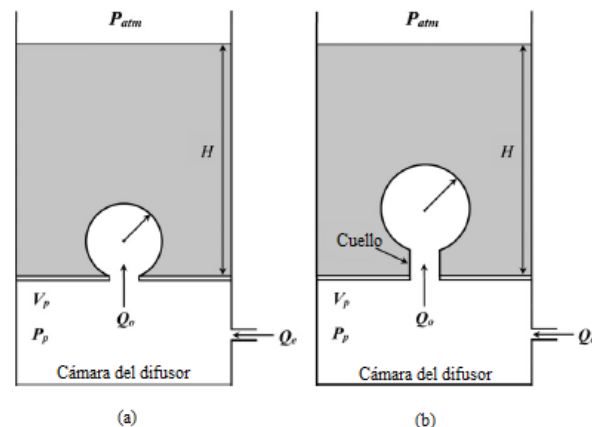


Figura 4-4.: Etapas de formación de una burbuja. Tomado de [59].

En la Figura 4-4, P_{atm} es la presión atmosférica, H es la profundidad de los difusores, V_p es el volumen del difusor, P_p es la presión del aire dentro del difusor, Q_a es el flujo volumétrico de aire que entra al sistema por cada orificio del difusor y Q_e es el flujo volumétrico de aire que entra al difusor.

Etapas de crecimiento de la burbuja

En la etapa de crecimiento la burbuja expande su diámetro mientras la base de la burbuja continua unida a la parte superior del orificio (Ver Figura 4-4). La formación se describe a partir de un balance de las fuerzas que actúan sobre una burbuja, como se presenta en (4-49). Las fuerzas que ejerce el líquido sobre la burbuja incluyen las fuerzas ascendentes (fuerza de flotación efectiva (F_B) y fuerza de momentum del gas (F_M), y las fuerzas de resistencia descendentes (fuerza de arrastre (F_D), fuerza de tensión superficial (F_σ), fuerza inercial de la burbuja ($F_{I,g}$) y fuerza de Basset (F_{Basset}). Otras dos fuerzas descendentes que actúan sobre la burbuja son la fuerza de colisión entre las burbujas y las partículas sólidas cuando hay presencia de ellas en el medio (F_C) y la fuerza de suspensión inercial ($F_{I,m}$), que actúa debido a la aceleración del líquido y las partículas alrededor de la burbuja (Figura 4-5).

$$F_B + F_M = F_D + F_\sigma + F_{Basset} + F_{I,g} + F_C + F_{I,m} \quad (4-49)$$

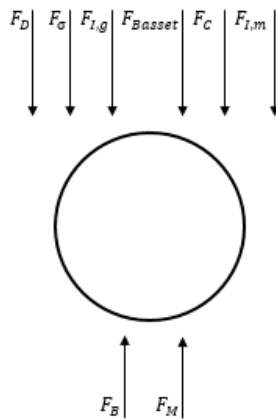


Figura 4-5.: Fuerzas que actúan sobre una burbuja.

Teniendo en cuenta el balance de fuerzas antes descrito, el modelo empleado para determinar el crecimiento del diámetro de la burbuja en la etapa de crecimiento, se presenta a continuación. Los supuestos realizados en [59] para el modelamiento de la etapa de crecimiento de la burbuja son:

- Se supone un solo orificio de difusión con el fin de eliminar la interacción con burbujas vecinas.

- Se desprecia la interacción entre las partículas sólidas y la burbuja de gas.
- Antes de la formación de la burbuja de gas no hay una caída de presión neta en el orificio y no hay presencia de una interfaz líquido-gas.
- A medida que aumenta la presión en la cámara de gas, la burbuja crece manteniendo una forma esférica permaneciendo unida al orificio.

La diferencia de presión en la cámara (P_p) y la presión en la burbuja (P_b) se puede expresar mediante (4-50), donde Q_a es la velocidad de flujo del gas a través de un orificio y k_0 es la constante del orificio.

$$|P_p - P_b| = \left(\frac{Q_a}{k_0} \right)^2 \quad (4-50)$$

El valor de k_0 se determina como una función del flujo de gas que pasa a través del orificio, Q_a , la densidad del gas, ρ_g , la viscosidad del gas, μ_g , el diámetro del orificio, d_o , y el espesor del plato del orificio, E . Teniendo en cuenta la caída de presión debida a la contracción y la ampliación, suponiendo que el área del orificio es mucho menor que el área de la cámara y reemplazando el factor de fricción por la expresión del flujo laminar en tubería completamente desarrollado, la expresión para k_0 es:

$$k_0 = \sqrt{\frac{2}{\rho_g C_g}} \left(\frac{\pi d_o^2}{4} \right) \quad (4-51)$$

Donde C_g se obtiene mediante (4-52):

$$C_g = 1,5 + \frac{16\pi\mu_g E}{\rho_g Q_0} \quad (4-52)$$

Q_0 está relacionada con la velocidad de cambio del volumen de la burbuja mediante la siguiente expresión

$$Q_0 = 4\pi r_b^2 \frac{dr_b}{dt} + U_{tf} \pi r_b^2 \quad (4-53)$$

donde r_b es el radio de la burbuja y U_{tf} es el componente vertical de la velocidad del gas. Dicha velocidad se asume como tres veces la velocidad mínima de fluidización, cuando se tienen burbujas esféricas ascendiendo a velocidad constante [21].

Asumiendo gas ideal, comportamiento adiabático dentro de la cámara, flujo constante de gas entrando a la cámara y presión uniforme dentro de la cámara, se puede determinar el cambio de

presión en la cámara en los dos etapas de formación (crecimiento y desprendimiento) a partir de (4-54).

$$\frac{dP_p}{dt} = \frac{\sigma P_p}{V_p} \left(Q_e - \left(4\pi r_b^2 \frac{dr_b}{dt} + U_{tf} \pi r_b^2 \right) \right) \quad (4-54)$$

donde σ es la relación de calor específico para el gas.

La presión en la burbuja puede estimarse mediante (4-55):

$$P_b = P_{atm} + \rho_b g H - \rho_L g (r_b - r_0) + \alpha_g \rho_L \left(\frac{3}{2} \left(\frac{dr_b}{dt} \right)^2 + r_b \frac{d^2 r_b}{dt^2} \right) \quad (4-55)$$

En la (4-55), r_0 es el radio del orificio, g es la aceleración de la gravedad, H es la profundidad del orificio, ρ_L es la densidad del líquido y α_g es un factor dependiente de la viscosidad del gas y se estima a partir de (4-56) [58].

$$\alpha = 9,08 + 1,66 \log_{10}(\mu_g) \quad (4-56)$$

Las ecuaciones para la etapa de crecimiento se resuelven simultáneamente junto con las siguientes condiciones iniciales:

$$\text{Para } t = 0, r_b = r_0, \frac{dr_b}{dt} = 0, P_p = P_{atm} + \rho_b g H = P_H.$$

La etapa de crecimiento termina cuando la sumatoria de las fuerzas de flotación (F_B) y momentum del gas (F_M) excede la sumatoria de la fuerza de arrastre (F_D) y la fuerza inercial de la burbuja ($F_{I,g}$).

$$F_B + F_M > F_{I,g} + F_D \quad (4-57)$$

donde

$$F_B = \frac{4\pi r_b^3}{3}(\rho_b - \rho_g)g \quad (4-58)$$

$$F_M = \frac{\rho_g Q_0^2}{\frac{1}{4}\pi d_o^2} \quad (4-59)$$

$$F_{I,g} = \left(\frac{11}{16}\rho_L + \rho_g\right) \left(4\pi r_b^2 \left(\frac{dr_b}{dt}\right)^2 + M \frac{d^2 r_b}{dt^2}\right) \quad (4-60)$$

$$F_D = 0,44\rho_L\pi r_b^2 \left(\frac{dr_b}{dt}\right)^2 \quad (4-61)$$

$$M = \left(\frac{11}{16}\rho_L + \rho_g\right) V_b g \quad (4-62)$$

donde V_b es el volumen de la burbuja en cada instante de tiempo.

Etapa de desprendimiento de la burbuja

En la etapa de desprendimiento, la burbuja se separa del orificio pero permanece unida a éste mediante un “cuello” (Ver Figura 4-4 (b)). Esta etapa finaliza cuando el cuello desaparece y la burbuja se desprende totalmente del orificio. En [58] mencionan que el cuello se rompe cuando el largo de este es igual al diámetro del orificio, en este punto la etapa de desprendimiento finaliza. La Ecuación (4-63) describe la etapa de desprendimiento, considerando la fuerza inercial, la fuerza de flotación, el momentum del gas y la fuerza de arrastre.

$$\frac{d}{dt}\left(M\frac{dS}{dt}\right) = (\rho_L - \rho_g)V_b g + \frac{4\rho_g Q_0^2}{\pi d_o^2} - \frac{1}{2}C_D\rho_L \left(\frac{dS}{dt}\right)^2 \pi r_b^2 \quad (4-63)$$

donde S es la distancia entre el orificio y el centro de la burbuja. En la etapa de desprendimiento se resuelven simultáneamente las ecuaciones de las etapas de crecimiento y de desprendimiento, con condiciones iniciales para la etapa de desprendimiento iguales a las condiciones finales de la etapa de crecimiento (denotados con subíndice fe):

$$\text{Para } t = 0, S = r_{b,fe}, \frac{dS}{dt} = \left.\frac{dr_b}{dt}\right|_{fe}$$

Resultados diámetro promedio de burbuja

Las ecuaciones diferenciales se formularon mediante espacio de estados y se resolvieron empleando un método de solución Runge-Kutta de cuarto orden. Teniendo en cuenta que la solución del modelo matemático para la planta piloto se da en segundos y el modelo de formación de una burbuja se da en milésimas de segundo, fue necesario realizar la solución del modelo de formación de

burbuja para diferentes condiciones de profundidad del difusor y flujo de gas.

Basándose en las condiciones de operación del sistema real que se tiene para validar el modelo, se propuso un intervalo de operación para el flujo volumétrico de aire que ingresa al difusor (4-65) y la profundidad del difusor (H) (Ver (4-66)) que depende del nivel de líquido en el tanque aireado (L_{II}) (4-64). Es importante mencionar que debido a la naturaleza fenomenológica del modelo de formación de burbuja, dicho modelo es aplicable a cualquier intervalo de operación.

$$H = L_{II} - 0,05 \quad (4-64)$$

$$1,67 \times 10^{-5} \leq Q_e \leq 5,83 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s} \quad (4-65)$$

$$0,05 \leq H \leq 0,35 \text{ m} \quad (4-66)$$

Teniendo en cuenta los parámetros de diseño del difusor y las condiciones de operación del sistema. Los parámetros empleados en la solución del modelo matemático de formación de burbuja se presentan en la Tabla 4-3.

Tabla 4-3.: Parámetros para la solución del modelo de formación de burbuja.

Parámetro de diseño	Descripción	Valor
Q_e	Flujo de aire que ingresa al difusor	1 a $35 \frac{L}{min}$
Q_m	Flujo de aire de mínima fluidización	$5 \frac{L}{min}$
d_o	Diámetro del orificio del difusor	0,001 m
μ_g	Viscosidad cinemática del aire	$1,8 \times 10^{-5} \text{ N s m}^{-2}$
E	Espesor de la pared del orificio del difusor	0,0035 m
ρ_g	Densidad del aire a $25^\circ C$	$1,0556 \text{ Kg m}^{-3}$
γ	Relación del calor específico para el aire a $25^\circ C$	1,4
V_p	Volumen de la cámara del difusor	$4,105 \times 10^{-4} \text{ m}^3$
ρ_L	Densidad del agua	1000 Kg m^{-3}
P_{atm}	Presión atmosférica	101325 Pa
g	Aceleración de la gravedad	$9,81 \text{ m s}^{-2}$
μ_L	Viscosidad cinemática del agua	$0,01 \text{ N s m}^{-2}$
α_g	Parámetro dependiente de la viscosidad del aire	4,1

Para determinar el valor de U_{tf} se empleó la (4-67), partiendo del valor de fluidización mínima del sistema real:

$$U_{tf} = \frac{Q_m}{A_{to}} \quad (4-67)$$

donde c es el número de orificios del difusor y A_{to} es el área transversal de un orificio del difusor.

En la Figura 4-6 se presenta la solución numérica del modelo matemático de formación de burbuja con valor para Q_e de $5,83 \times 10^{-4} m^3/s$ y H de $0,35 m$. En la gráfica se puede apreciar que el valor del radio de la burbuja para este caso específico es de $4,229 \times 10^{-3} m$, cuyo tiempo final de formación fue de $0,0151 s$. El radio de la burbuja cuando esta culmina la etapa de desprendimiento se determina a partir del largo del cuello, el cual se obtiene al restar la longitud del centro de la burbuja hasta el orificio y el radio de la burbuja ($s - r_b$), cuando este valor sea igual al diámetro del orificio (d_o), la burbuja se desprende del difusor y de esta forma se determina el radio de esta.

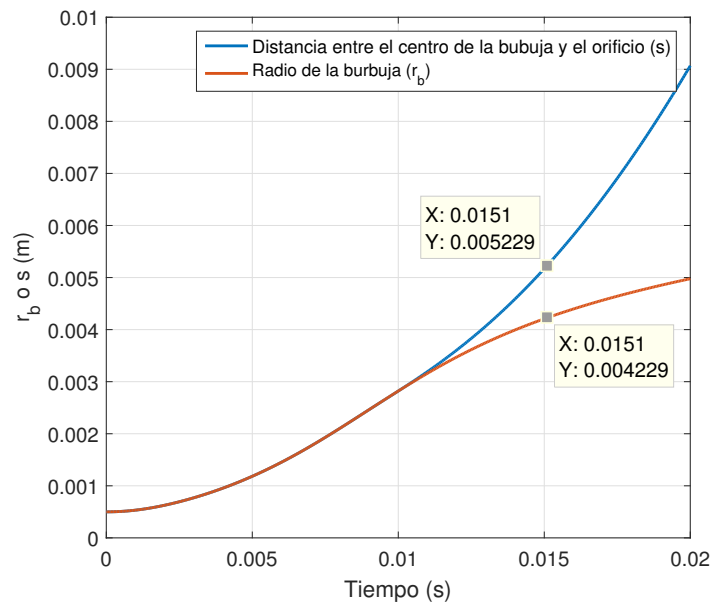


Figura 4-6.: Solución del modelo de formación de burbuja para $Q_e = 5,83 \times 10^{-4} m^3/s$ y $H = 0,35 m$.

El procedimiento mostrado anteriormente se realizó para diferentes valores de Q_e y H , en los intervalos de operación mostrados en (4-65) y (4-66), respectivamente. La Figura 4-7 presenta la superficie de respuesta del modelo a los diferentes valores asignados a los parámetros mencionados.

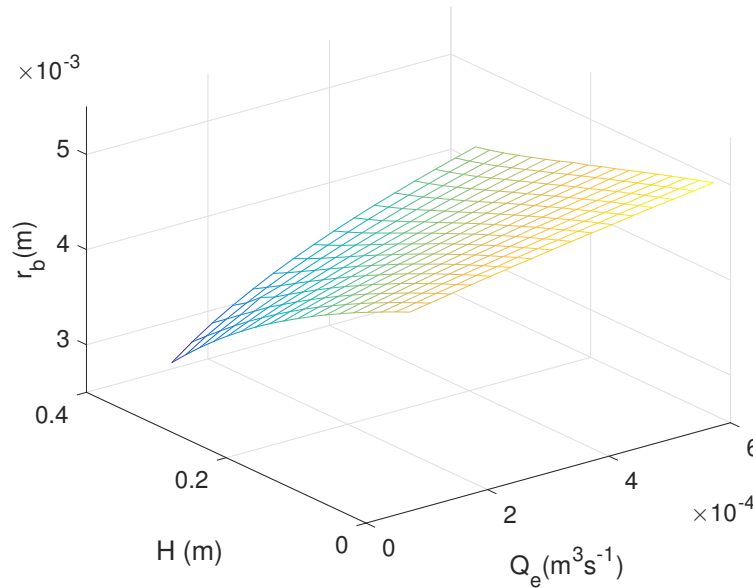


Figura 4-7.: Superficie de respuesta del modelo de formación de burbuja a diferentes valores de H y Q_e .

Debido a que la formación de una burbuja tarda entre 0,01068 y 0,01706 s , es decir, en el orden de milisegundos y sabiendo que el modelo semifísico de base fenomenológica de la planta piloto aireada por difusión se resuelve en el orden de segundos, se decidió obtener una ecuación constitutiva que permita determinar el valor del radio de la burbuja. Con los resultados obtenidos en cada set de valores para Q_e y H , se ajustó una ecuación polinómica de grado dos (Ver (4-68)), donde el radio de la burbuja depende del flujo volumétrico de aire a la entrada y la profundidad del difusor, cuyo porcentaje de error máximo es de 5,3056 % y porcentaje de error promedio es de 0,0771 %. Dicho ajuste se realizó empleando la herramienta Curve Fitting del software Matlab®.

$$r_b = p_{00} + p_{10}Q_e + p_{01}H + p_{20}Q_e^2 + p_{11}Q_eH + p_{02}H^2; \quad (4-68)$$

donde $p_{00} = 0,004491$, $p_{10} = 1,368$, $p_{01} = -0,004336$, $p_{20} = -959,7$, $p_{11} = 4,818$ y $p_{02} = -0,001822$.

Por lo tanto la expresión empleada para determinar el diámetro de la burbuja es $d_b = 2 r_b$.

4.7.3. Retención de gas

La retención de gas se determinó mediante la relación entre el volumen total de burbujas y el volumen total de líquido contenidos en el tanque de proceso (Ver (4-69)).

$$\epsilon_G = \frac{V_b}{V_L} \quad (4-69)$$

donde V_b es el volumen total de las burbujas contenidas en el tanque y V_L es el volumen total de líquido en el tanque. Reemplazando se tiene que la expresión para la retención de gas es:

$$\epsilon_G = \frac{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{d_b}{2}\right)^3 N_b}{\pi \left(\frac{D_{II}}{2}\right)^2 L_{II}} \quad (4-70)$$

donde N_b es la cantidad de burbujas contenidas en el tanque de proceso, D_{II} es el diámetro del tanque de proceso y L_{II} es el nivel del líquido contenido en el tanque de proceso. Simplificando la expresión se obtiene que:

$$\epsilon_G = \frac{2}{3} \frac{d_b^3 N_b}{L_{II} D_{II}} \quad (4-71)$$

En la Figura 4-8 se aprecia el cambio de la retención de gas con respecto a el diámetro de la burbuja para valores de $D_{II} = 0,4 \text{ m}$, $L_{II} = 0,35 \text{ m}$ y $N_b = 705$, el cual fue obtenido como se menciona en la Sección 4.9.2. A partir de la respuesta mostrada en la figura se concluye que un valor constante para la retención de gas no permite observar el fenómeno de transferencia de masa adecuadamente, ya que la retención de gas tiene un comportamiento dinámico influenciado por parámetros como el diámetro de la burbuja, el número de burbujas y el nivel de líquido en el tanque aireado.

De acuerdo a lo mencionado en [42], en sistemas aireados por difusión se pueden distinguir dos regímenes de flujo asociados a la velocidad superficial del gas y la retención del gas. El régimen de flujo homogéneo se caracteriza por tener burbujas de tamaño y forma casi uniforme. Este tipo de flujo se da cuando la velocidad superficial del gas (V_g) es más baja que una velocidad de transferencia, $V_g < V_{trans}$, en este caso la distribución de burbujas está en el intervalo $1 - 7 \text{ mm}$, por lo que el tamaño de burbuja puede considerarse uniforme e invariable en el tiempo. En el régimen de flujo heterogéneo, existe una distribución de tamaño de burbuja, al contrario del flujo homogéneo. Este régimen se da cuando la velocidad superficial del gas supera la velocidad de transferencia, $V_g > V_{trans}$. Como mencionan los autores, el cambio de régimen de homogéneo a heterogéneo, se da cuando la velocidad superficial del gas supera los $0,037 \text{ m s}^{-1}$ aproximadamente y la retención del gas es mayor que 0,11.

En la Figura 4-9, se presenta el cambio de la retención del gas con respecto a la velocidad superficial para un nivel de líquido, $L_{II} = 0,35$. Partiendo de lo mencionado en [42] se puede apreciar que el régimen de flujo en el que opera el tanque de aireación que se está estudiando es homogéneo, por lo tanto puede asumirse que el diámetro de la burbuja no cambia a medida que asciende en el líquido y el diámetro alcanzado por la burbuja al finalizar la etapa de desprendimiento se conservará hasta que la burbuja salga del tanque de aireación.

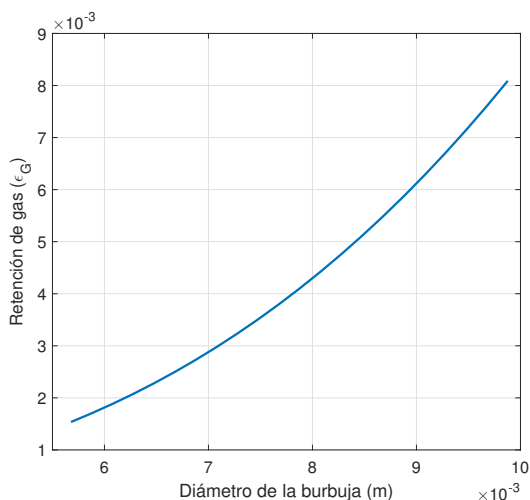


Figura 4-8.: Cambio de la retención de gas con respecto al diámetro de la burbuja.

4.7.4. Área específica transferencia de masa

Para determinar el área específica de transferencia de masa se tuvo en cuenta la relación entre el área superficial de una esfera (considerando que todas las burbujas son esféricas) y el volumen de dicha esfera (Ver (4-72)).

$$a = \frac{4\pi \left(\frac{d_b}{2}\right)^2 \epsilon_G}{\frac{4}{3}\pi \left(\frac{d_b}{2}\right)^3} = \frac{6}{d_b} \epsilon_G \quad (4-72)$$

En la Figura 4-10 se presenta el cambio del área específica de transferencia de masa con respecto a la retención de gas (Figura 4-10 (a)) y el diámetro de la burbuja (Figura 4-10 (b)). En la figura se puede apreciar que el cambio con respecto a ambas variables es proporcional. Además se puede concluir que el comportamiento tanto de la retención del gas como del diámetro de la burbuja es dinámico y por ende el valor del área específica de transferencia de masa también tiene un comportamiento dinámico, por lo tanto asumirla constante no representa el fenómeno adecuadamente.

4.7.5. Secuestrante de oxígeno

Las sustancias capaces de remover el oxígeno disuelto en agua o de sistemas acuosos, son usualmente conocidas como secuestrantes de oxígeno. En la industria y la investigación, los secuestrantes de oxígeno son usados para prevenir reacciones oxidativas en metales y otras sustancias. Por ejemplo, en la industria de aceites, los secuestrantes de oxígeno son usados para prevenir la corrosión en tubos de metal y equipos de proceso. En la industria de alimentos, los secuestrantes de oxígeno son empacados y puestos en bodegas de almacenamiento para la preservación de los alimentos. En la industria química, los secuestrantes de oxígeno son adicionados a calderas, hor-

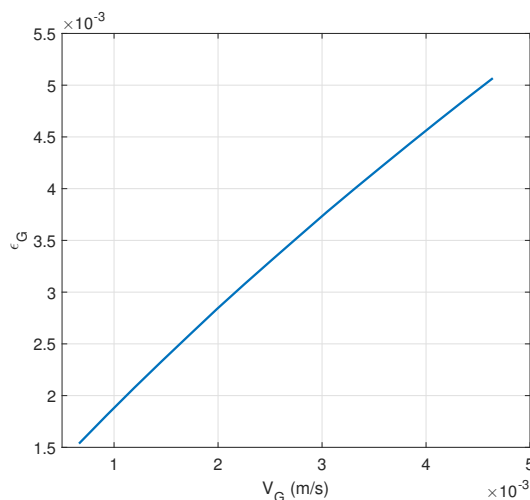


Figura 4-9.: Cambio de la retención de gas con respecto a la velocidad superficial del gas.

nos y sistemas de fluidos de servicio, con el fin de evitar su corrosión [39]. Las sustancias más comúnmente usadas como secuestrantes de oxígeno son:

- Bisulfito, metabisulfito y sales de sulfito
- Hidrazinas
- Hidroxilaminas
- Aldehidos activados
- Compuestos polihidroxílicos

En la literatura científica se pueden encontrar estudios en los que presentan la emulación de la respiración bacteriana a partir de agentes químicos secuestrantes de oxígeno. Sin embargo, la mayoría de los estudios presentados se centran en la cinética de reacciones catalizadas de sales de sulfito [32, 55, 28, 60]. Los estudios presentados por [29] y [34] se centran en el uso de sulfito de sodio mediante reacciones no catalizadas, cuyo mecanismo de reacción está dado por las reacciones (4-73) a (4-75):



Las cinéticas de reacción con respecto a la concentración de oxígeno han sido ampliamente estudiadas, sin embargo, pocos estudios han sido realizados con respecto al coeficiente cinético y

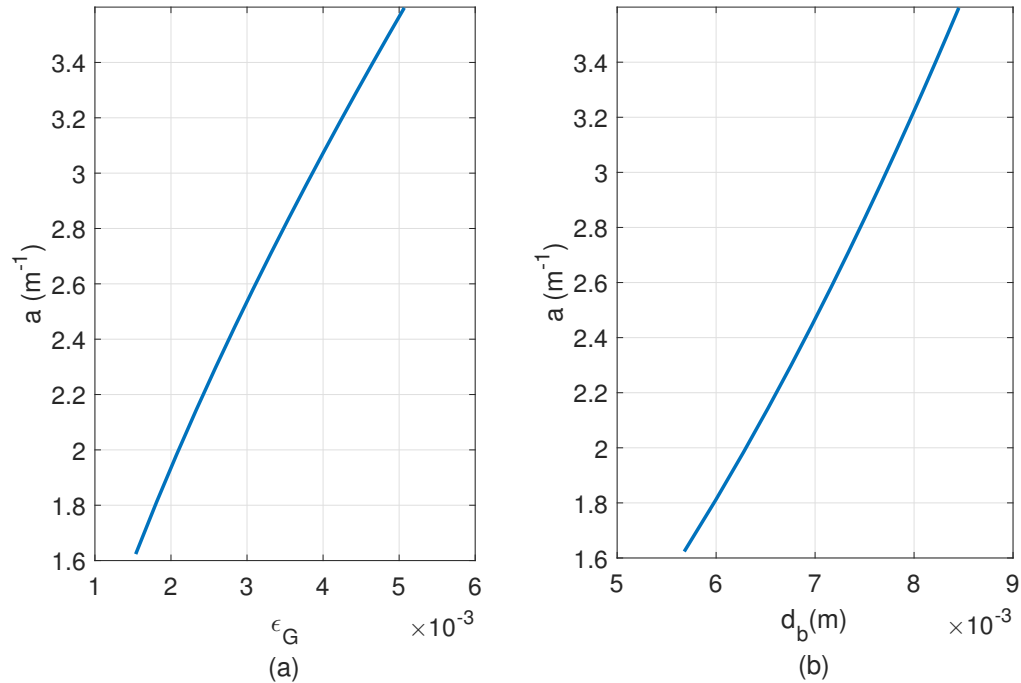


Figura 4-10.: Cambio del área específica de transferencia de masa con respecto a la retención del gas y el diámetro de la burbuja.

orden de reacción del secuestrante de oxígeno. En [34] y [54] estudiaron la cinética de reacciones de sulfito no catalizadas. En el estudio realizado en [34], encontraron que tanto para reactores de tanque agitado como para piscinas quietas de soluciones de sulfito, la reacción con respecto a la concentración de sulfito sigue una cinética de orden cero y de 0,65 con respecto a la concentración de oxígeno disuelto. Por su parte en [54] presentaron un estudio en el que evalúan tres secuestrantes de oxígeno (sulfito de sodio, bisulfito de sodio y piro-sulfito de sodio), encontrando que estos siguen una cinética de orden cero y tienen un coeficiente cinético similar, el cual es dependiente del pH de la solución.

El metabisulfito de sodio ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_5$) se usó como agente secuestrante de oxígeno. La estructura de las reacciones cinéticas para el consumo de oxígeno disuelto y de secuestrante de oxígeno se presenta en (4-76) y (4-77). El valor numérico para los parámetros cinéticos K_{os} , z y k_s , fue obtenido mediante identificación de parámetros a partir de datos experimentales.

$$\dot{r}_{O_2,i} = M_{OD}k_{OS}C_{OS}^zV_i \quad (4-76)$$

$$\dot{r}_{OS,i} = k_sV_i \quad (4-77)$$

donde $\dot{r}_{O_2,i}$ es la velocidad de consumo de oxígeno en el SdeP i , M_{OD} es el peso molecular del

oxígeno, k_{OS} es el coeficiente cinético de consumo de oxígeno, z es el orden de reacción con respecto al secuestrante de oxígeno, C_{OS} es la concentración de secuestrante de oxígeno, V_i es el volumen de líquido en el sistema de proceso, $\dot{r}_{OS,i}$ es la velocidad de consumo del secuestrante de oxígeno en el sistema de proceso i y k_s es el coeficiente cinético de consumo de secuestrante de oxígeno.

4.7.6. Transferencia de calor desde la resistencia eléctrica al fluido de proceso

La transferencia de calor desde la resistencia eléctrica al fluido de proceso en el intercambiador de calor, se obtuvo a partir de (4-78), la cual proviene de las leyes de Joule y Ohm. El calor transferido es función del calor máximo transferido desde la resistencia eléctrica al fluido (\dot{Q}_{max}), el valor de la resistencia eléctrica (R_{el}), la eficiencia del intercambiador de calor (ε), el voltaje aplicado (V) y el ciclo de encendido del relé (u_r).

$$\dot{Q}_1 = u_r \dot{Q}_{max} = u_r \varepsilon \frac{V^2}{R_{el}} \quad (4-78)$$

4.7.7. Flujo volumétrico de salida del tanque aireado

Las Ecuaciones (4-79) y (4-80) permiten determinar el flujo volumétrico a la salida del $SdeP_{II}$, las cuales fueron adaptadas de [56].

$$\dot{v}_3 = C_v \sqrt{\frac{\rho_L g L_{II}}{G}} \quad (4-79)$$

$$C_v = \begin{cases} 0 & \text{if } u_v < 0,1 \\ R^{(u_v-0,7)} C_{v_{max,a}} & \text{if } 0,1 \leq u_v \leq 0,66 \\ u_v C_{v_{max,b}} & \text{if } u_v > 0,66 \end{cases} \quad (4-80)$$

donde G es la gravedad específica del agua, C_v es el coeficiente flujo de la válvula en la corriente de salida del $SdeP_{II}$, $C_{v_{max}}$ es coeficiente de flujo máximo de la válvula en la corriente de salida del $SdeP_{II}$ dependiente de la característica de flujo inherente de la válvula, R es la constante ran-geabilidad de la válvula y u_v es la fracción de apertura de la válvula.

Teniendo en cuenta que C_v es dependiente de la fracción de apertura. La ecuación para este parámetro fue obtenida mediante datos experimentales de flujo volumétrico y fracción de apertura. A bajas fracciones de apertura, no se evidencia flujo a través de la válvula. Con fracciones de apertura moderadas, la válvula presenta un comportamiento inherentemente isoporcentual ($C_{v_{max,a}}$) y a grandes fracciones de apertura, la válvula presenta un comportamiento lineal ($C_{v_{max,b}}$).

4.7.8. Concentración de equilibrio de oxígeno disuelto en agua

Las ecuaciones empleadas para determinar la concentración de equilibrio del oxígeno disuelto fueron adaptadas de las correlaciones presentadas por [27] y [14].

$$T_s = \text{Log} \left(\frac{571,3 - T_3}{T_3} \right) \quad (4-81)$$

$$D_{O_0} = 1,42905 \exp(A + B T_s + C T_s^2 + D T_s^3 + E T_s^4 + F T_s^5) \quad (4-82)$$

$$\theta_0 = 0,00097 - 1,42 \times 10^{-5} (T_3 - 273,15) + 6,44 \times 10^{-8} (T_3 - 273,15)^2 \quad (4-83)$$

$$P_v = \exp \left(11,8571 - \frac{3840,7}{T_3} - \frac{216961}{T_3^2} \right) \quad (4-84)$$

$$F_p = \frac{(P - P_v)(1 - \theta_0 P)}{(1 - P_v)(1 - \theta_0)} \quad (4-85)$$

$$C_{O_2}^* = \frac{D_{O_0} F_p}{1000} \quad (4-86)$$

donde $A = 2,00907$, $B = 3,22014$, $C = 4,05010$, $D = 4,94457$, $E = -0,256847$, $F = 3,88767$, $P = 0,8389 Pa$, T_s es la transformación logarítmica de la temperatura, D_{O_0} es la solubilidad del oxígeno disuelto por masa o por volumen de agua a la temperatura de equilibrio, P_v presión parcial de los gases y F_p concentración de equilibrio de oxígeno disuelto en situaciones donde la presión atmosférica es diferente a $1 atm = 101325 Pa$.

4.7.9. Otras ecuaciones constitutivas

En las Ecuaciones (4-87) a (4-92), se presentan las expresiones que permiten identificar parámetros relacionados con el flujo del líquido a través del circuito, la adición de secuestrante de oxígeno, la disipación de calor y la profundidad del difusor.

$$\dot{v}_2 = u_p \dot{v}_{2,max} \quad (4-87)$$

$$V_I = \pi \left(\frac{D_I}{2} \right)^2 L_I \quad (4-88)$$

$$\dot{m}_{OS} = u_{OS} / 2000 \quad (4-89)$$

$$\dot{Q}_i = h_i \pi D_i L_i (T_j + T_\infty) \quad (4-90)$$

$$\dot{v}_{2,max} = 2,24 \times 10^{-5} L_{III} + 4,37 \times 10^{-5} \quad (4-91)$$

$$H = \begin{cases} 0,05 & \text{if } L_{II} \leq 0,05 \\ L_{II} - 0,05 & \text{otros casos} \end{cases} \quad (4-92)$$

donde u_p representa la fracción de bombeo en la planta piloto de aireación, u_{OS} es la masa de secuestrante de oxígeno adicionada al tanque, m_{OS} es el flujo másico de secuestrante adicionado

al tanque, h_i es el término convectivo del coeficiente de transferencia de calor, D_i es el diámetro del tanque del $SdeP_i$ y L_i es el nivel de líquido en el $SdeP_i$ (con $i = I, II, III$), T_j es la temperatura en la corriente j (con $j = 1, 2, 3$) y T_∞ es la temperatura ambiente.

4.8. Grados de libertad

Para evaluar los grados de libertad del modelo matemático, se deben tener en cuenta las variables, parámetros, ecuaciones diferenciales y ecuaciones constitutivas. Teniendo en cuenta lo anterior, en la Tabla 4-4 se presentan los grados de libertad del modelo matemático.

Tabla 4-4.: Grados de libertad del modelo matemático

	Variables	Parámetros	Total
Desconocidas	11	34	45
Ecuaciones o valores	11	26	37
Grados de libertad			8

Teniendo en cuenta la tabla anterior, los grados de libertad del modelo matemático son 8, por lo tanto hay 8 parámetros que deben ser identificados para tener un modelo soluble. Los parámetros a identificar son: k_{OS} , z , k_s , R_{el} , R , $C_{v_{max,a}}$, $C_{v_{max,b}}$ y N_b . En el Anexo A, se presenta el modelo completo y los símbolos empleados en este (Tabla A-1).

4.9. Solución numérica del modelo matemático

El modelo matemático fue simulado en MATLAB R2015b usando una función *ode4* (Solucionador Runge Kutta de cuarto orden). Los datos experimentales usados constan de 9235 muestras con un tiempo de muestreo de 1 s. A continuación se presenta el diseño experimental y la identificación de parámetros de la planta piloto.

4.9.1. Diseño experimental de las entradas del modelo matemático

La planta piloto aireada por difusión, tiene cinco variables de entrada las cuales pueden ser manipuladas con el fin de excitar las dinámicas del sistema para la identificación de éste. Dichas variables de entrada son: posición del relé del intercambiador de calor (u_r), fracción de bombeo a la salida del tanque auxiliar (u_p), fracción de apertura de la válvula de aire a la entrada del tanque aireado (u_b), fracción de apertura de la válvula de salida de la corriente líquida del tanque aireado (u_v) y secuestrante de oxígeno adicionado al medio (u_{OS}). Dichas entradas son manipuladas por medio del relé eléctrico, el encendido y apagado de la bomba de recirculación, la válvula de aguja

proporcional, la válvula de salida manual y la adición de cantidades específicas de secuestrante de oxígeno, respectivamente.

Las entradas mediante escalones son ampliamente usadas para la identificación de procesos químicos y bioquímicos. Para este trabajo, los datos para la identificación son recopilados después de aplicar la secuencia adaptada presentada en la Figura 4-11. Todas las entradas escalonadas se aplican una a una después de alcanzar el estado estable, con el fin de evitar problemas de identificación [12].

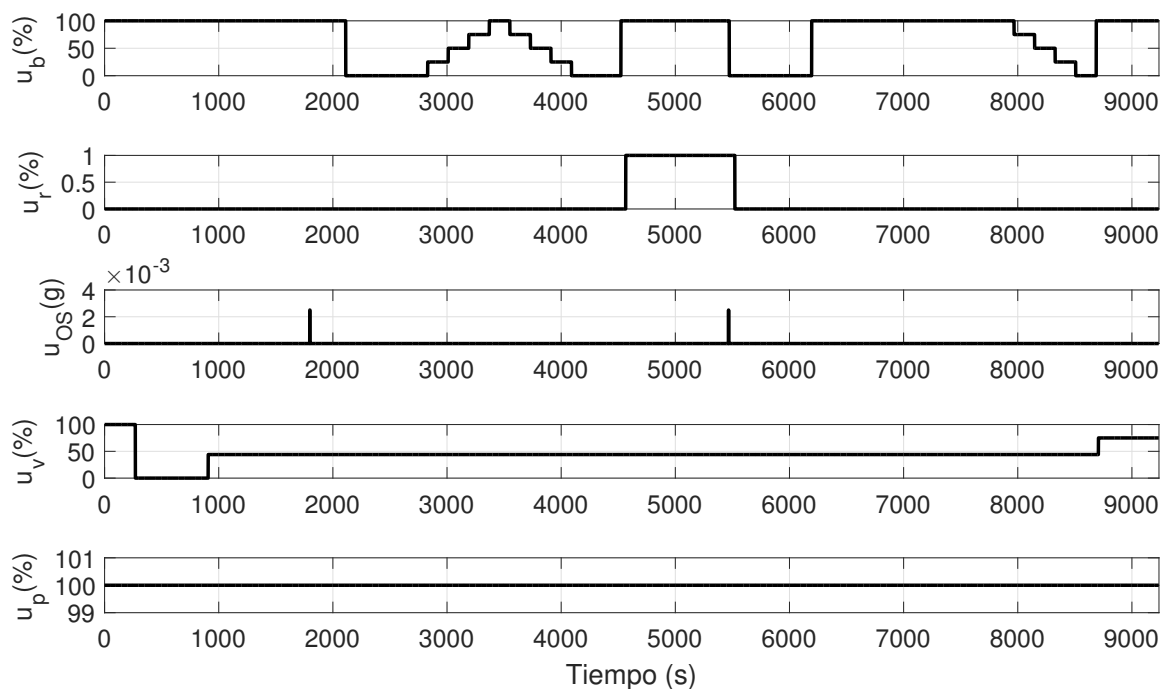


Figura 4-11.: Variables de entrada aplicadas al modelo matemático y la planta piloto de aireación.

4.9.2. Identificación de parámetros

La identificación de parámetros se formuló como un problema de optimización y resolvió por medio de estrategias metaheurísticas, tales como: recocido simulado (SA por sus siglas en inglés) y algoritmos genéticos (GA por sus siglas en inglés). Debido a las fuertes no linealidades que posee el modelo matemático, emplear métodos de optimización basados en gradiente, puede generar que el optimizador converja en un mínimo local [17]. Teniendo en cuenta lo anterior y realizando una comparación en los costos computacionales al emplear SA y GA, el algoritmo empleado para realizar la identificación de parámetros fue SA.

El funcional de costo se definió como se presenta en (4-93), en términos de tres datos disponibles: nivel, temperatura y concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_{II}$.

$$\% error_{\zeta} = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} \left| \frac{y_{\zeta_i} - \hat{y}_{\zeta_i}}{y_{\zeta_i}} \right|}{n} 100 \quad (4-93)$$

donde n es el número de muestras, y_{ζ_i} es el i -ésimo valor medido, \hat{y}_{ζ_i} es el i -ésimo valor predicho por el modelo para la medición, $\% error_{\zeta}$ es el porcentaje de error para cada identificación de parámetros. En este caso, $\zeta = 1$ corresponde a mediciones de nivel, $\zeta = 2$ corresponde a mediciones de temperatura y $\zeta = 3$ corresponde a mediciones de concentración de oxígeno disuelto en el tanque aireado.

Inicialmente, se realizó la identificación de los parámetros relacionados con las dinámicas de nivel y temperatura, desacoplando el modelo matemático y empleando las medidas de temperatura y nivel obtenidas en la planta piloto. Posteriormente se fijaron los valores de dichos parámetros identificados y se continuó con la identificación de los parámetros relacionados con la dinámica de oxígeno disuelto y secuestrante de oxígeno, empleando el modelo matemático completo y las medidas de concentración de oxígeno disuelto.

El valor de los parámetros obtenidos en la primera identificación fueron: resistencia eléctrica $R_{el} = 13,6598 \text{ } [\Omega]$, coeficiente de flujo de la válvula manual para el comportamiento isopercentual $C_{v_{max,a}} = 3,47221 \times 10^{-6} \text{ } [m^3/s/Pa]$, constante de rangeabilidad de la válvula $R = 95$ y coeficiente de flujo de la válvula manual para el comportamiento lineal $C_{v_{max,b}} = 5,396809 \times 10^{-6} \text{ } [m^3/s/Pa]$. La validación de las dinámicas de nivel y temperatura se presentan en la Figuras **4-12** (a) y **4-12** (b), respectivamente. En ambas gráficas, las líneas azules continuas corresponden a los datos experimentales de nivel y temperatura tomados en el tanque aireado ($SdeP_{II}$), los datos correspondientes a las líneas en guiones rojas corresponden a los datos predichos por el modelo para el nivel y la temperatura en el $SdeP_{II}$ y las líneas punteadas verdes corresponden a los datos de nivel y temperatura en el tanque auxiliar ($SdeP_{III}$). Finalmente, la línea de puntos y guiones morada en Figura **4-12** (b), corresponde a la temperatura en la corriente de salida del intercambiador de calor (entrada al tanque aireado).

En la Figura **4-12** (a), se puede observar que cuando se presentan cambios en el nivel del tanque aireado, el MSBF sigue la trayectoria mostrada por los datos experimentales. En el tanque auxiliar no se cuenta con datos experimentales que permitan validar el comportamiento del modelo matemático, sin embargo es de esperarse que cuando el nivel en el $SdeP_{II}$ aumente, el nivel en el $SdeP_{III}$ disminuya y viceversa, fenómeno que se aprecia en la gráfica. Con respecto a la dinámica de temperatura (**4-12** (b)), el MSBF presenta el mismo comportamiento que presentan los datos experimentales en el tanque aireado (Ver Tabla **4-5**). La dinámica de temperatura en los otros dos sistemas de proceso tiene un comportamiento acorde con lo esperado, la temperatura en el inter-

cambiador de calor ($SdeP_I$) tiene una dinámica más rápida que los demás $SdeP$ debido a que el volumen de éste $SdeP$ es más pequeño con respecto a los demás. En el tanque auxiliar, el cambio en la dinámica es más lento debido a su tamaño.

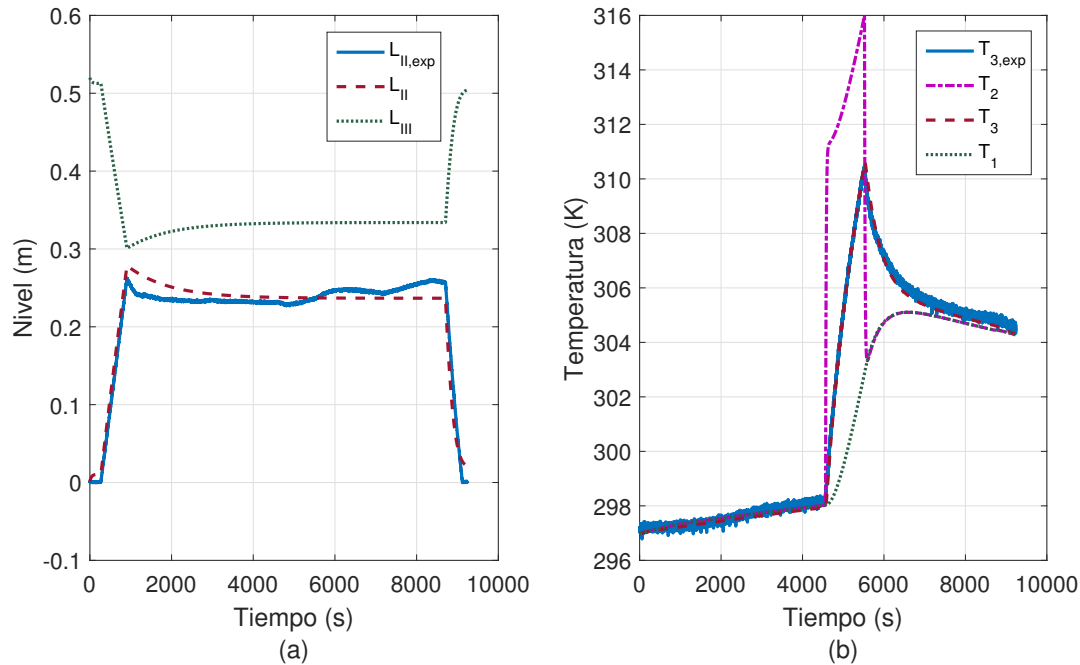


Figura 4-12.: Respuesta dinámica y validación del modelo para (a) nivel y (b) temperatura.

En la segunda identificación de parámetros, se obtuvieron los valores para los parámetros cinéticos, $k_{OS} = 1,1 \times 10^{-3}$, $k_s = 4,285 \times 10^{-7}$ y $z = 1,1$, además del número de burbujas, $N_b = 705$. En la Figura 4-13 se presenta la validación de las dinámicas de concentración de oxígeno disuelto (4-13 (a)) y secuestrante de oxígeno (4-13 (b)). La línea azul en la Figura 4-13 (a), corresponde a los datos experimentales de concentración de oxígeno disuelto tomados en el tanque aireado, los datos correspondientes a las líneas con guiones rojas en ambas figuras corresponden a los datos de concentración de oxígeno disuelto y secuestrante en el tanque aireado entregados por el modelo matemático ($SdeP_{II}$), respectivamente, y los datos de las líneas punteadas verdes en ambas figuras corresponden a concentración de oxígeno disuelto y de secuestrante en el tanque auxiliar ($SdeP_{III}$).

En la Figura 4-13 (a), se puede apreciar que el modelo matemático tiene un comportamiento similar al presentado por los datos experimentales. Cuando se da un aumento o disminución en el porcentaje de apertura de la válvula de control de flujo de aire, el modelo matemático intenta seguir dichos cambios. Igualmente sucede cuando hay adición de secuestrante de oxígeno al medio, en los datos experimentales se observa una disminución en la concentración de oxígeno disuelto en

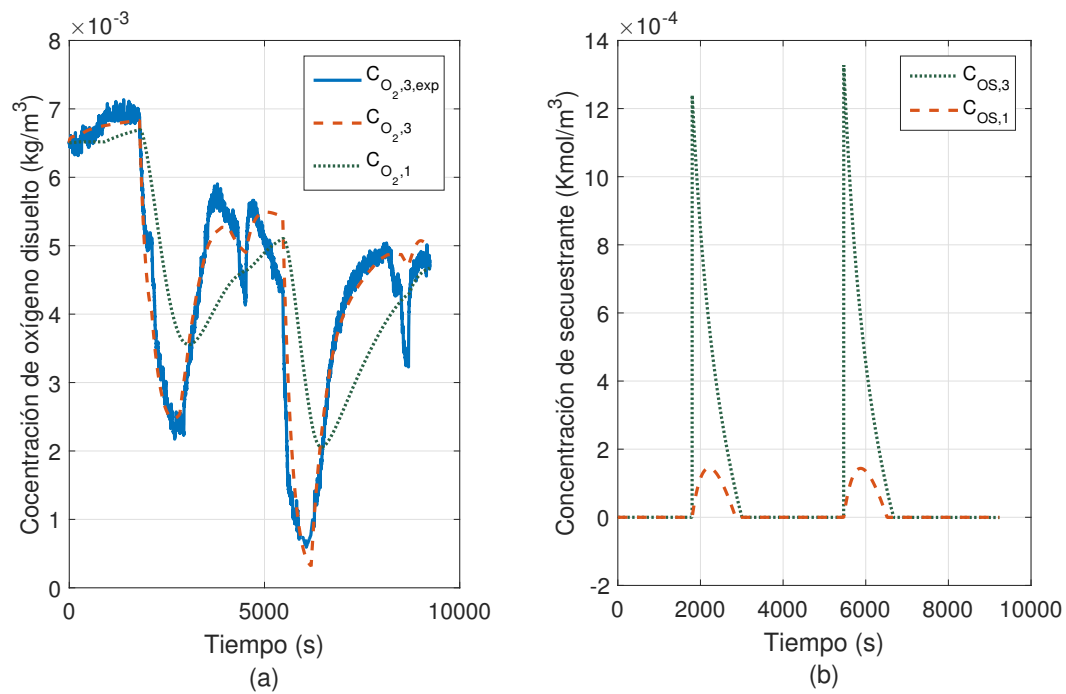


Figura 4-13.: Respuesta dinámica y validación del modelo para (a) concentración de oxígeno disuelto y (b) secuestrante de oxígeno.

el $SdeP_{II}$, disminución que también puede ser apreciada en los datos entregados por el modelo matemático.

En la Tabla 4-5, se presentan los porcentajes de error para las dinámicas de nivel, temperatura y concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_{II}$. Con el fin de validar el modelo matemático, se realizó una comparación del comportamiento de la dinámica de la concentración de oxígeno disuelto al emplear otras ecuaciones constitutivas para la determinación del coeficiente de transferencia de masa, esta comparación y validación se presenta en la Sección 4.10.

Tabla 4-5.: Porcentajes de error para las dinámicas de nivel, temperatura y concentración de oxígeno disuelto.

Variable	% Error promedio
L_{II}	2.9471
T_3	0.0568
$C_{O_2,3}$	9.3756

4.10. Validación del modelo matemático

Para la validación del MSBF y la ecuación constitutiva propuesta en las Secciones 4.7.1 a 4.7.4, se resolvió el modelo empleando diferentes aproximaciones teóricas y no teóricas para el coeficiente volumétrico de transferencia de masa.

En el estudio presentado en [46] se reporta un valor constantes para el coeficiente volumétrico de transferencia de masa. Por lo tanto, se identificó un valor numérico independiente del tiempo para el coeficiente volumétrico de transferencia de masa como se presenta en 4-94.

$$k_L a = K \quad (4-94)$$

Adicionalmente, algunos autores consideran una relación lineal entre el coeficiente volumétrico de transferencia de masa y la fracción de flujo volumétrico de aire que ingresa al tanque aireado (u_b) [15], [20] y [9], tal como se presenta en (4-95).

$$k_L a = K u_b \quad (4-95)$$

Teniendo en cuenta que en la literatura científica se han presentado correlaciones empíricas que permiten determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa, en este estudio se comparó la respuesta del modelo matemático al emplear las correlaciones propuestas en [53] y [48] (4-96), (4-97), respectivamente.

$$k_L a_B = K \left(\frac{D}{v} \right)^{1/2} \left(\frac{\dot{v}_4}{A_{TII}} \right)^{6/5} H^{1/10} \quad (4-96)$$

$$\frac{D_{II}^2 \cdot k_L a}{D} = 0,030 \cdot Re^{1,906} \cdot Fr^{-0,631} \cdot \left(\frac{d_b}{H} \right)^{-0,23} \cdot \left(\frac{L_{II}}{D_{II}} \right)^{-0,120} \cdot \left(\frac{A_d}{A_{TII}} \right)^{0,326} \\ \cdot \left(\frac{D_{II}}{H} \right)^{0,164} \cdot \left(\frac{L_{II}}{H} \right)^{0,173} \cdot \left(\frac{L_{II} A_{TII}}{A_d^{1,5}} \right)^{-0,01} \quad (4-97)$$

donde K es un parámetro a estimar, D es la difusividad del aire en el agua, v es la viscosidad cinemática del agua y A_d es el área de cobertura del difusor.

Otra de las ecuaciones que permiten determinar el coeficiente de transferencia de masa que fue evaluada, es la presentada por Kawase et al. en el 1987 [38], la cual está basada en las teoría de la penetración de Higbie, la teoría de Kolmogorov y el estudio presentado por Kastanek en el año 1977 [37].

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L}{\pi} \sqrt{\frac{V_G g}{\mu_L}}} \quad (4-98)$$

donde V_G es la velocidad superficial del aire, μ_L es la viscosidad dinámica del líquido, g es la aceleración de la gravedad y D es la difusividad del gas en el líquido. Teniendo en cuenta que la expresión propuesta por [38] no tiene en cuenta el área específica de transferencia de masa, $k_L a = k_L \cdot a$, donde a se determinará mediante (4-72).

Finalmente, se evaluó la respuesta del MSBF al emplear la ecuación propuesta para la retención de gas (4-71) y la expresión propuesta en [61] (4-99).

$$\epsilon_G = 0,91 \frac{V_G^{1,19}}{\sqrt{g} d_b} \quad (4-99)$$

El MSBF se resolvió bajo ocho casos diferentes, esto con el fin de realizar la comparación entre los índices de error y las respuestas del modelo matemático con respecto a la concentración de oxígeno disuelto. Los parámetros identificados a partir de las dinámicas de temperatura y nivel y el valor del parámetro cinético k_s , no fueron identificados nuevamente, sus valores se fijaron de acuerdo con la identificación de parámetros mencionada en la Sección 4.9.2.

- Kawase₁: en este caso se obtuvo el valor del k_L por medio de la ecuación propuesta en [38] y el valor para el área específica de transferencia de masa se obtuvo por medio de identificación de parámetros.
- Kawase₂: para este caso se empleó la ecuación de [38], la ecuación para la retención de gas presentada en [61] y el d_b fue obtenido por medio de identificación de parámetros.
- Higbie₁: en este caso se empleó la ecuación de [33], además de (4-68), (4-71) y (4-72) para el diámetro promedio de la burbuja, la retención de gas, y el área específica de transferencia de masa, respectivamente. Los parámetros cinéticos K_{OS} y z fueron fijados en el valor que se identificó en Kawase₁.
- Higbie₂: en este caso se empleó la ecuación de [33], además de (4-68), (4-71) y (4-72) para el diámetro promedio de la burbuja, la retención de gas, y el área específica de transferencia de masa, respectivamente. Los parámetros cinéticos K_{OS} y z fueron fijados en el valor que se identificó en Kawase₂.
- Constante: el valor para el coeficiente volumétrico de transferencia de masa, $k_L a$, fue obtenido mediante identificación de parámetros y fijado como un valor constante independiente del tiempo.
- Lineal: teniendo en cuenta (4-95), se obtuvo un valor para la constante K mediante identificación de parámetros.
- Schierholz: en este caso se empleó (4-96) para determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa y se identificaron los valores de los parámetros cinéticos K_{OS} y z , además del valor para la constante K , presente en la correlación.

- Pittoors: en este caso se empleó la correlación propuesta en [48] (4-97). Los parámetros identificados en este caso fueron K_{OS} , z , d_b y A_d .

Con respecto a los valores para los parámetros cinéticos K_{OS} y z , en el caso de Kawase₁ y Higbie₁, y Kawase₂ y Higbie₂, se emplearon el mismo conjunto de parámetros. Dichos parámetros fueron obtenidos mediante la identificación de parámetros empleando la expresión propuesta por [38]. Lo anterior con el fin de realizar una comparación en la que sólo se tuviera en cuenta la influencia de los parámetros asociados a la transferencia de masa desde la fase gaseosa a la fase líquida. Los parámetros cinéticos fueron fijados y solo se modificaron los demás valores asociados a cada caso.

Además del porcentaje de error promedio, para la comparación se empleó el índice de error ITAE (Ver (4-100)), donde t es el tiempo, t_0 y t_f es el tiempo inicial y final, respectivamente, $C_{O_2,3}$ es la concentración de oxígeno disuelto en el tanque aireado medida experimentalmente y $\hat{C}_{O_2,3}$ es la concentración de oxígeno disuelto en el tanque aireado predicha por el modelo.

$$ITAE = \int_{t_0}^{t_f} t | C_{O_2,3} - \hat{C}_{O_2,3} | dt \quad (4-100)$$

La Figura 4-14 presenta una comparación del comportamiento de la concentración de oxígeno disuelto en el *SdeP_{II}*, empleando diferentes aproximaciones teóricas y no teóricas para el coeficiente de transferencia de masa y en la Tabla 4-6 se presentan los parámetros identificados y los índices de error asociados a cada caso. En la 4-14 se pueden observar diferencias en la dinámica de la concentración de oxígeno disuelto, lo cual puede atribuirse a la estructura de la correlación empleada, que como se mencionó anteriormente puede ser de carácter empírico o fenomenológico. En la Tabla 4-6 se puede apreciar que el caso en el que se presenta menor % error y menor ITAE es en el de Higbie₂, lo cual puede ser atribuido a la naturaleza fenomenológica de las ecuaciones que se emplean en este caso. La expresión empleada para el diámetro promedio de la burbuja a pesar de ser una correlación empírica, proviene de datos de simulación de naturaleza fenomenológica, ya que se obtuvieron al resolver el modelo de formación de burbuja. La expresión para la retención del gas, fue obtenida al realizar una relación entre el volumen de gas y el volumen de líquido contenido en el tanque de proceso, relación acorde con la porosidad de un lecho empacado. Por lo anterior, se puede decir que tener mayor conocimiento del fenómeno mejora las predicciones del MSBF con respecto a la concentración de oxígeno disuelto en el tanque aireado (*SdeP_{II}*).

Es importante mencionar que los índices de error que se presentan al emplear la correlación propuesta en [38], son menores que los errores que se presentan en los casos de constante, lineal, Schierholz y Pittoors. Emplear una correlación teórica puede mejorar los resultados del modelo matemático, sin embargo, emplear ecuaciones de naturaleza fenomenológica a la hora de determinar los valores de a y d_b pueden mejorar los resultados aún más.

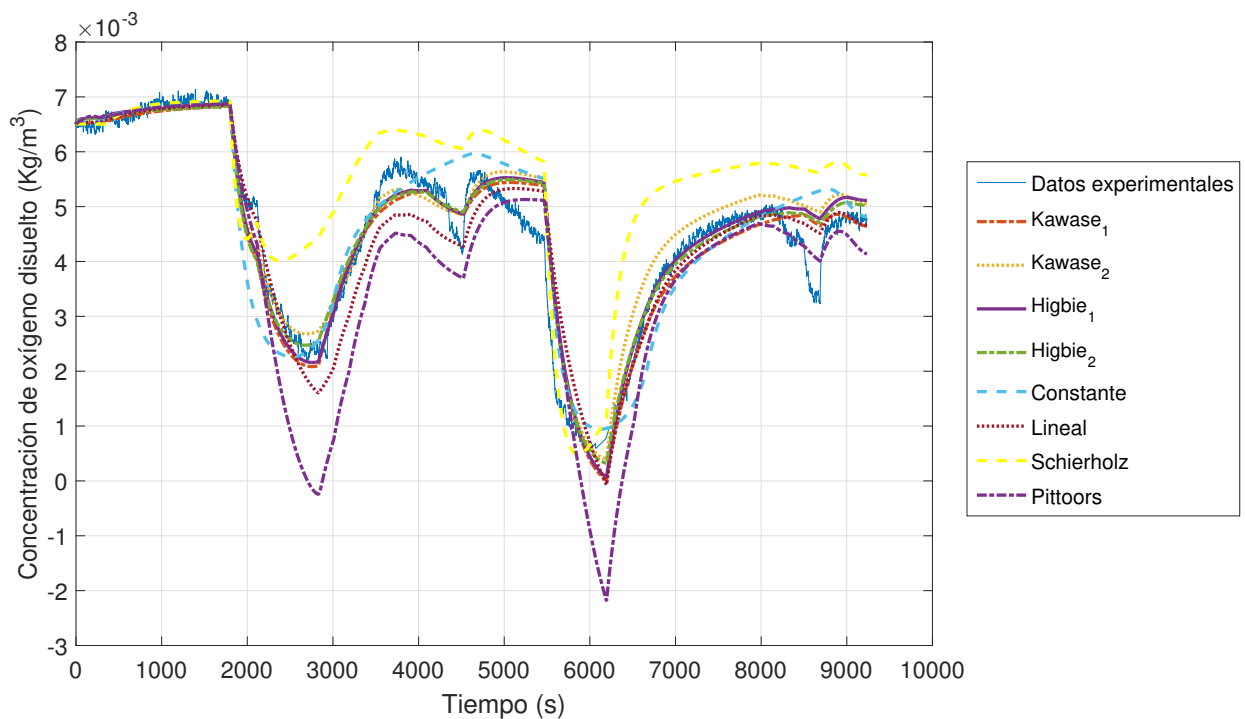


Figura 4-14.: Respuesta dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en el $SdePII$, usando diferentes correlaciones empíricas y teóricas para el coeficiente de transferencia de masa.

El comportamiento del coeficiente volumétrico de transferencia de masa en cada caso se presenta en la Figura 4-15. En la gráfica se puede apreciar que para los casos en los que se emplea la ecuación de Higbie, el comportamiento al inicio y al final de la simulación cambia con respecto a los demás casos, este comportamiento se atribuye al uso de ecuaciones que permiten determinar el diámetro promedio de la burbuja y el área específica de transferencia de masa, considerando su comportamiento dinámico y dependiente de estados y entradas del proceso, tales como el cambio en el flujo volumétrico de aire y el nivel del líquido en el tanque aireado.

En la Figura 4-16 se presenta la dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en el tanque auxiliar ($SdePIII$) para los diferentes casos evaluados. Como se puede apreciar la concentración de oxígeno disuelto toma valores negativos al emplear el valor constante para el coeficiente de transferencia de masa, fenómeno que no se presenta en los demás casos, a partir de esto se puede deducir que tener en cuenta la característica dinámica del coeficiente volumétrico de transferencia de masa, mejora los resultados predichos por el modelo semifísico de base fenomenológica.

Sabiendo que el caso en el cual el MSBF presenta mejor ajuste es el de Higbie₂, se puede concluir que al separar el coeficiente de transferencia de masa (k_L) y el área específica de transferencia de masa (a), se logra una mejor descripción del fenómeno de transferencia de masa, mejora que se ve

Tabla 4-6.: Parámetros óptimos e índices de error.

Caso	K	k_{OS}	z	d_b	a	N_b	A_d	% error	ITAE
Kawase ₁	-	$3,78 \times 10^{-4}$	0,962	-	15,56	-	-	10,99	$1,55 \times 10^4$
Kawase ₂	-	1×10^{-3}	1,1	0,002	-	-	-	11,51	$1,94 \times 10^4$
Higbie ₁	-	$3,78 \times 10^{-4}$	0,962	-	-	955	-	10,17	$1,45 \times 10^4$
Higbie ₂	-	1×10^{-3}	1,1	-	-	705	-	9,38	$1,41 \times 10^4$
Constante	$3,8 \times 10^{-3}$	$1,95 \times 10^{-5}$	0,463	-	-	-	-	14	$2,25 \times 10^4$
Lineal	$2,5 \times 10^{-3}$	$2,13 \times 10^{-5}$	0,584	-	-	-	-	13,27	$1,69 \times 10^4$
Schierholz	116.5208	4.1252	2.2585	-	-	-	-	29.98	$4,83 \times 10^4$
Pittoors	-	$2,44 \times 10^{-6}$	0.251	0.026	-	-	$7,85 \times 10^{-5}$	31.48	$3,07 \times 10^4$

reflejada en el porcentaje de error del modelo matemático con respecto a los datos experimentales.

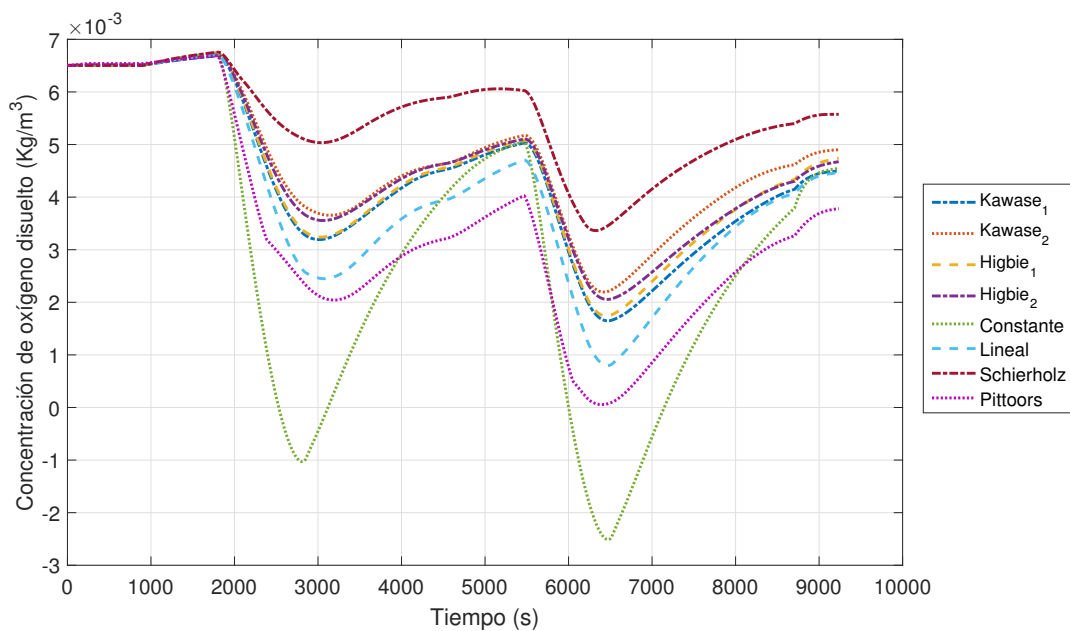


Figura 4-16.: Respuesta dinámica de la concentración de oxígeno disuelto en el $SdeP_{III}$, usando diferentes correlaciones empíricas y teóricas.

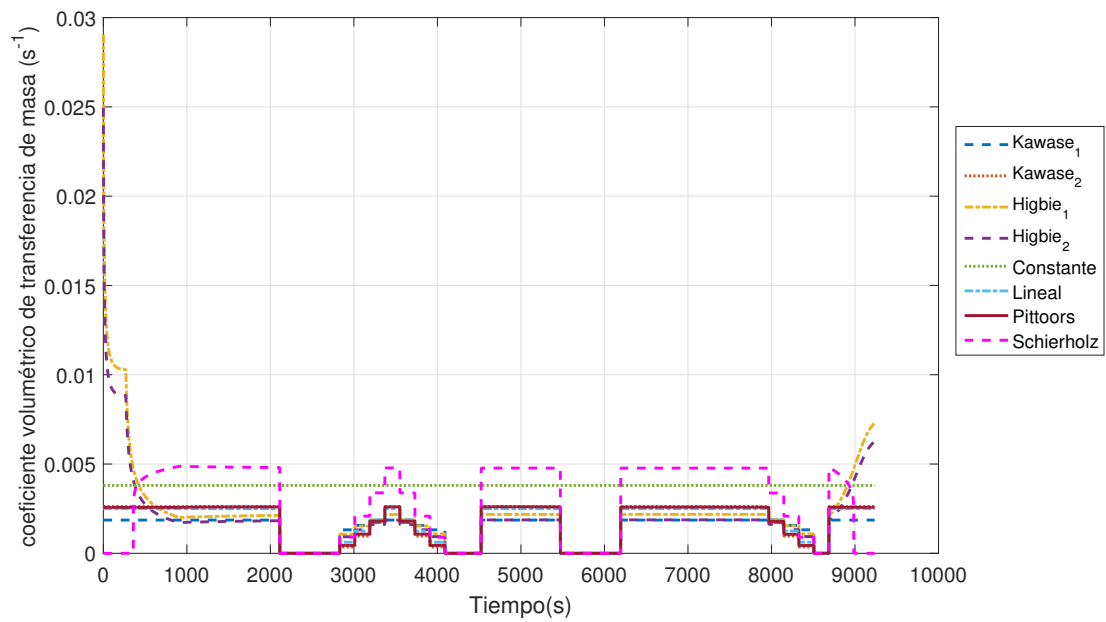


Figura 4-15.: Respuesta dinámica del coeficiente volumétrico de transferencia empleando diferentes expresiones matemáticas.

5. Conclusiones y trabajo futuro

5.1. Conclusiones

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos, se puede concluir que el nivel del líquido en el tanque aireado y el flujo del aire, son parámetros que tienen alta influencia en el fenómeno de transferencia de masa, ya que estos están incluidos en todas las expresiones matemáticas empleadas en la determinación del coeficiente volumétrico de transferencia de masa, diámetro promedio de burbuja (4-68), área específica de transferencia de masa (4-72) y retención de gas (4-71).

En el estudio presentado se revisaron diferentes aproximaciones teóricas y no teóricas que permiten determinar el coeficiente volumétrico de transferencia de masa. A partir del análisis de dichas correlaciones se puede concluir que obtener el coeficiente volumétrico de transferencia de masa a partir de expresiones teóricas disminuye el error que se presenta entre los datos experimentales y los datos arrojados por el MSBF (Ver Tabla 4-6).

A partir de los resultados obtenidos se puede concluir que considerar el cambio del diámetro promedio de la burbuja, con respecto a el flujo volumétrico de aire y el nivel del líquido en el tanque aireado, mejora las predicciones del MSBF, ya que éste parámetro permite tener en cuenta la característica dinámica de la retención del gas y el área interfacial de transferencia de masa. Con lo anterior, se logró que el MSBF describa mejor el fenómeno de transferencia de masa que se presenta en un sistema de aireación por difusión, ideal para tareas de control.

Finalmente, la evaluación por separado obtención del coeficiente de transferencia de masa, k_L , y el área interfacial de transferencia de masa, a , mejora la predicción del modelo matemático. Lo anterior, se concluye debido a que se obtuvieron menores porcentajes de error entre los datos experimentales y los datos del modelo matemático, cuando se emplearon las expresiones teóricas de Kawase y Higbie para la determinación del coeficiente de transferencia de masa y el área interfacial de transferencia de masa se obtuvo por diferentes medios como identificación de parámetros (Ver Sección 4.10 y Tabla 4-6).

5.2. Trabajo futuro

Teniendo en cuenta que la ecuación propuesta para determinar la retención de gas tiene asociado el número de burbujas presentes en el tanque de proceso (N_b), como trabajo futuro se propone emplear un metodología que permita determinar dicho parámetro fenomenológicamente, lo cual podría mejorar la predicción del modelo matemático.

Teniendo en cuenta que los valores de los parámetros cinéticos K_{OS} , k_s y z , se obtuvieron mediante identificación de parámetros. Dichos parámetros pueden ser caracterizados mediante la ecuación de Arrhenius ($K(T) = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$), la cual tiene una dependencia de la temperatura y la energía de activación. Para realizar dicha caracterización, es necesario obtener el valor del factor preexponencial (A) y la energía de activación (E_a) mediante datos experimentales de concentración de oxígeno disuelto y concentración de secuestrante de oxígeno.

De acuerdo al supuesto realizado en el modelo de formación de burbuja donde se supone un solo orificio de difusión con el fin de eliminar la interacción con burbujas vecinas, se propone evaluar dicho modelo teniendo en cuenta dicha interacción. Además, de considerar que en el ascenso de la burbuja a través del tanque de aireación hay otros tipos de interacción que generan rompimiento y coalescencia de burbujas.

La identificación de parámetros con una secuencia de entradas diferente puede afectar los valores finales identificados para los parámetros del modelo. La identificación del modelo es un proceso iterativo en el que se ajusta una estructura del modelo a unos datos experimentales definidos. Este proceso iterativo podría incluir análisis de sensibilidad paramétrica, análisis de identificabilidad estructural, clasificación global de parámetros, análisis de identificabilidad práctica y un diseño experimental óptimo. No obstante, en el desarrollo de esta tesis de maestría no fueron abordados dichos estudios, por lo que podría ser abordados con el fin de mejorar la predicción del MSBF.

El modelo matemático desarrollado se realizó con miras a un sistema de control que permita reducir los costos energéticos de un planta de tratamiento de aguas residuales, a partir del control de la aireación. Como trabajo futuro se propone la implementación de dicho sistema de control y la evaluación energética de la planta piloto de aireación por difusión.

A. Anexo: Modelo semifísico de base fenomenológica de una planta piloto de aireación por difusión

$$\begin{aligned}
\dot{v}_1 &= \dot{v}_2 \\
C_{O_2,1} &= C_{O_2,2} \\
C_{OS,1} &= C_{OS,2} \\
\frac{dT_2}{dt} &= \frac{\dot{v}_2}{V_I} (T_1 - T_2) + \frac{\dot{Q}_1 - \dot{Q}_I}{C_P \rho V_I} \\
\frac{dL_{II}}{dt} &= \frac{1}{A_{TII}} (\dot{v}_2 - \dot{v}_3) \\
\frac{dC_{O_2,3}}{dt} &= \frac{1}{A_{TII} L_{II}} (\dot{v}_2 C_{O_2,2} - \dot{v}_3 C_{O_2,3}) + k_{La} (C_{O_2}^* - C_{O_2,3}) - M_{OD} k_{OS} C_{OS,3}^z - \frac{C_{O_2,3}}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \\
\frac{dC_{OS,3}}{dt} &= \frac{1}{A_{II} L_{II}} \left(\frac{\dot{m}_{OS}}{M_{OS}} + \dot{v}_2 C_{OS,2} - \dot{v}_3 C_{OS,3} \right) - k_s - \frac{C_{OS,3}}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \\
\frac{dT_3}{dt} &= \frac{1}{A_{TII} L_{II}} (\dot{v}_2 T_2 - \dot{v}_3 T_3) - \frac{\dot{Q}_{II}}{C_P \rho L_{II} A_{TII}} - \frac{T_3}{L_{II}} \frac{dL_{II}}{dt} \\
\frac{dL_{III}}{dt} &= \frac{1}{A_{TIII}} (\dot{v}_3 - \dot{v}_1) \\
\frac{dC_{O_2,1}}{dt} &= \frac{1}{A_{TIII} L_{III}} (\dot{v}_3 C_{O_2,3} - \dot{v}_1 C_{O_2,1}) - M_{OD} k_{OS} C_{OS,1}^z - \frac{C_{O_2,1}}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \\
\frac{dC_{OS,1}}{dt} &= \frac{1}{A_{TIII} L_{III}} (\dot{v}_3 C_{OS,3} - \dot{v}_1 C_{OS,1}) - k_s - \frac{C_{OS,1}}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \\
\frac{dT_1}{dt} &= \frac{1}{A_{TIII} L_{III}} (\dot{v}_3 T_3 - \dot{v}_1 T_1) - \frac{Q_{III}}{C_P \rho L_{III} A_{TIII}} - \frac{T_1}{L_{III}} \frac{dL_{III}}{dt} \\
k_L &= 2 \sqrt{\frac{D}{\pi t_c}} \\
t_c &= d_b \frac{\epsilon_G}{V_G} \\
a &= 6 \frac{\epsilon_G}{d_b} \\
d_b &= 2 (p_{00} + p_{10} \dot{v}_4 + p_{01} H + p_{20} \dot{v}_4^2 + p_{11} \dot{v}_4 H + p_{02} H^2) \\
\epsilon_G &= \frac{2}{3} \frac{d_b^3 N_b}{L_{II} D_{II}} \\
V_G &= \frac{\dot{v}_4}{A_{TII}}
\end{aligned}$$

$$\dot{v}_4 = \dot{v}_{4,max} u_b$$

$$\dot{Q}_1 = u_r \varepsilon \frac{V^2}{Re_l}$$

$$\dot{v}_3 = C_v \sqrt{\frac{\rho g L_{II}}{G}}$$

$$C_v = \begin{cases} 0 & \text{if } u_v < 0,1 \\ R^{(u_v-0,7)} C_{v,max,a} & \text{if } 0,1 \leq u_v \leq 0,66 \\ u_v C_{v,max,b} & \text{if } u_v > 0,66 \end{cases}$$

$$T_s = \text{Log} \left(\frac{571,3 - T_3}{T_3} \right)$$

$$D_{O_0} = 1,42905 \exp(A + B T_s + C T_s^2 + D T_s^3 + E T_s^4 + F T_s^5)$$

$$\theta_0 = 0,00097 - 1,42 \times 10^{-5} (T_3 - 273,15) + 6,44 \times 10^{-8} (T_3 - 273,15)^2$$

$$P_v = \exp \left(11,8571 - \frac{3840,7}{T_3} - \frac{216961}{T_3^2} \right)$$

$$F_p = \frac{(P - P_v)(1 - \theta_0 P)}{(1 - P_v)(1 - \theta_0)}$$

$$C_{O_2}^* = \frac{D_{O_0} F_p}{1000}$$

$$\dot{v}_2 = u_p \dot{v}_{2,max}$$

$$V_I = \pi \left(\frac{D_I}{2} \right)^2 L_I$$

$$\dot{m}_{OS} = u_{OS} / 2000$$

$$\dot{Q}_i = h_i \pi D_i L_i (T_j + T_{inf})$$

$$\dot{v}_{2,max} = 2,24 \times 10^{-5} L_{III} + 4,37 \times 10^{-5}$$

$$H = \begin{cases} 0,05 & \text{if } L_{II} \leq 0,05 \\ L_{II} - 0,05 & \text{otros casos} \end{cases}$$

Tabla A-1.: Símbolos relacionados con el modelo de proceso

Símbolo	Tipo	Valor	Unidades	Símbolo	Tipo	Valor	Unidades
L_{II}	V	-	m	T_{inf}	P	300,15	K
L_{III}	V	-	m	H	P	(4-92)	m
$C_{O_2,1}$	V	-	kg/m^3	t_c	P	(2-36)	s
$C_{O_2,2}$	V	-	kg/m^3	d_b	P	(4-68)	m

Símbolo	Tipo	Valor	Unidades	Símbolo	Tipo	Valor	Unidades
$C_{O_2,3}$	V	-	kg/m^3	ϵ_G	P	(4-71)	-
$C_{OS,1}$	V	-	$kmol/m^3$	N_b	P	605	-
$C_{OS,2}$	V	-	$kmol/m^3$	p_{00}	P	0,004491	m
$C_{OS,3}$	V	-	$kmol/m^3$	p_{10}	P	1,368	s/m^2
T_1	V	-	K	p_{01}	P	-0,004336	-
T_2	V	-	K	p_{20}	P	-959,7	s^2/m^5
T_3	V	-	K	p_{11}	P	4,818	s/m^3
\dot{v}_1	P	(4-5)	m^3/s	p_{02}	P	-0,001822	$1/m$
\dot{v}_2	P	(4-87)	m^3/s	V_G	P	(4-47)	m/s
\dot{v}_3	P	(4-79)	m^3/s	\dot{v}_4	P	(4-48)	m^3/s
V_I	P	(4-88)	m^3	T_s	P	(4-81)	-
\dot{Q}_1	P	(4-78)	W	D_{O_0}	P	(4-82)	-
\dot{Q}_I	P	(4-90)	W	θ_0	P	(4-83)	-
\dot{Q}_{II}	P	(4-90)	W	P_v	P	(4-84)	-
\dot{Q}_{III}	P	(4-90)	W	F_p	P	(4-85)	-
k_L	P	(2-35)	m/s	A	P	2,00907	-
a	P	(4-72)	m^2/m^3	B	P	3,22014	-
$C_{O_2}^*$	P	(4-86)	Kg/m^3	C	P	4,05010	-
k_{OS}	P	$1,1 \times 10^{-3}$	$\frac{(Kmol/m^3)^{1-z}}{s}$	D	P	4,94457	-
k_S	P	$4,285 \times 10^{-7}$	$Kmol/m^3/s$	E	P	-0,256847	-
z	P	1,1	-	F	P	3,88767	-
\dot{m}_{OS}	P	(4-89)	Kg/s	P	C	0,8389	atm
\dot{Q}_{max}	P	(4-78)	W	ρ	C	1000	Kg/m^3
ε	P	0,8	-	g	C	9,81	m/s^2
V	P	220	V	G	C	1	-
Re_l	P	13,6598	Ω	π	C	3,1416	-
C_v	P	(4-80)	$m^3/s/Pa$	D_I	C	0,11	m
R	P	95	-	L_I	C	0,075	m
$C_{v_{max,a}}$	P	$3,47221 \times 10^{-6}$	$m^3/s/Pa$	D_L	C	$1,86 \times 10^{-9}$	m^2/s
$C_{v_{max,b}}$	P	$5,39681 \times 10^{-6}$	$m^3/s/Pa$	C_P	C	4184	$J/Kg/K$
$\dot{v}_{2,max}$	P	(4-91)	m^3/s	$A_{T_{II}}$	C	0,1274	m^2
h_I	P	8,0986	$W/m^2/K$	$A_{T_{III}}$	C	0,159	m^2
h_{II}	P	6,6814	$W/m^2/K$	M_{OD}	C	32	$g/Kmol$
h_{III}	P	56,27	$W/m^2/K$	M_{OS}	C	126,043	$g/Kmol$

Bibliografía

- [1] AKITA, Kiyomi ; YOSHIDA, Fumitake: Gas holdup and volumetric mass transfer coefficient in bubble columns. Effects of liquid properties. En: *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 12 (1973), Nr. 1, p. 76–80
- [2] AKITA, Kiyomi ; YOSHIDA, Fumitake: Bubble size, interfacial area, and liquid-phase mass transfer coefficient in bubble columns. En: *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 13 (1974), Nr. 1, p. 84–91
- [3] AL-AHMADY, Kossay K.: Mathematical Model for Calculating Oxygen Mass Transfer Coefficient in Diffused Air Systems. En: *Al-Rafadain Engineering Journal* 19 (2011), Nr. 4
- [4] ÁLVAREZ, H.: *Introducción al diseño simultáneo de proceso y control*. EAE-Berlín. EAE Editorial Academia Española, 2012. – ISBN 978–3–8465–7538–3
- [5] ÁLVAREZ, H ; GÓMEZ, L ; BOTERO, H: Abstracciones Macroscópicas de la Fenomenología para el Modelado de Procesos. En: *XXVII Congreso Interamericano y colombiano de Ingeniería Química*, 2014, p. 6–8
- [6] ÁLVAREZ, Hernán ; LAMANNA, Rosalba ; VEGA, Pastora ; REVOLLAR, Silvana: Metodología para la obtención de modelos semifísicos de base fenomenológica aplicada a una sulfatadora de jugo de caña de azúcar. En: *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial RIAI* 6 (2009), Nr. 3, p. 10–20
- [7] ÁLVAREZ, Hernan ; OROZCO, Fernando. *Capítulo 6. Perdidas de energia en el fluido*. 2014
- [8] ÅMAND, Linda ; OLSSON, Gustaf ; CARLSSON, Bengt: Aeration control—a review. En: *Water Science and Technology* 67 (2013), Nr. 11, p. 2374–2398
- [9] AMICARELLI, Adriana ; DI SCIASCIO, F ; TOIBERO, JM ; ÁLVAREZ, H: Including dissolved oxygen dynamics into the Bt δ -endotoxins production process model and its application to process control. En: *Brazilian Journal of Chemical Engineering* 27 (2010), Nr. 1, p. 41–62
- [10] ASADI, Ali ; VERMA, Anoop ; YANG, Kai ; MEJABI, Ben: Wastewater treatment aeration process optimization: A data mining approach. En: *Journal of Environmental Management* 203 (2017), p. 630 – 639. – Waste Management with emphasis on municipal waste, biowaste and industrial waste. – ISSN 0301–4797

- [11] ATEHORTÚA, P: *Modelado del proceso de producción de δ -endotoxinas de Bacillus thuringiensis en un reactor discontinuo alimentado a pulsos con retención celular completa*, M. Sc. Thesis. Universidad Nacional de Colombia. Medellín, Colombia, Tesis de Grado, 2004
- [12] BALSACANTO, Eva ; ALONSO, Antonio A. ; BANGA, Julio R.: An iterative identification procedure for dynamic modeling of biochemical networks. En: *BMC systems biology* 4 (2010), Nr. 1, p. 11
- [13] BAYRAMOĞLU, M ; ÇAKICI, A ; TEKIN, T: Modelling of oxygen transfer rate in diffused-air aeration tanks. En: *Process Safety and Environmental Protection* 78 (2000), Nr. 3, p. 209–212
- [14] BENSON, Bruce B. ; KRAUSE, Daniel: The concentration and isotopic fractionation of gases dissolved in freshwater in equilibrium with the atmosphere. 1. Oxygen. En: *Limnology and Oceanography* 25 (1980), Nr. 4, p. 662–671
- [15] BOCKEN, SM ; BRAAE, M ; DOLD, PL: Dissolved oxygen control and oxygen utilization rate estimation: Extension of the holmberg/olsson method. En: *Water Pollution Research and Control Brighton*. Elsevier, 1988, p. 1197–1208
- [16] BOUAIFI, Mounir ; HEBRARD, Gilles ; BASTOUL, Dominique ; ROUSTAN, Michel: A comparative study of gas hold-up, bubble size, interfacial area and mass transfer coefficients in stirred gas–liquid reactors and bubble columns. En: *Chemical engineering and processing: Process intensification* 40 (2001), Nr. 2, p. 97–111
- [17] BURKE, Edmund K. ; KENDALL, Graham [u. a.]: *Search methodologies*. Springer, 2005
- [18] CALDERBANK, P.H. ; MOO-YOUNG, M.B.: The continuous phase heat and mass-transfer properties of dispersions. En: *Chemical Engineering Science* 16 (1961), Nr. 1-2, p. 39–54. – ISBN 00092509
- [19] CAMERON, Ian T. ; HANGOS, Katalin: *Process modelling and model analysis*. Vol. 4. Elsevier, 2001
- [20] CHEN, CY ; ROTH, JA ; ECKENFELDER JR, WW: Response of dissolved oxygen to changes in influent organic loading to activated sludge systems. En: *Water Research* 14 (1980), Nr. 10, p. 1449–1457
- [21] DAVIDSON, JF ; HARRISON, D: *Fluidized Particles* Cambridge Univ. En: *Press, Cambridge* (1963)
- [22] DORAN, Pauline M.: *Bioprocess engineering principles*. Academic press, 1995
- [23] DUDLEY, J: Mass transfer in bubble columns: a comparison of correlations. En: *Water research* 29 (1995), Nr. 4, p. 1129–1138

- [24] FAYOLLE, Yannick ; COCKX, Arnaud ; GILLOT, Sylvie ; ROUSTAN, Michel ; HÉDUIT, Alain: Oxygen transfer prediction in aeration tanks using CFD. En: *Chemical Engineering Science* 62 (2007), Nr. 24, p. 7163–7171
- [25] FICK, Adolph: V. On liquid diffusion. En: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 10 (1855), Nr. 63, p. 30–39
- [26] GALACTION, A-I ; CASCAVAL, Dan ; ONISCU, Corneliu ; TURNEA, Marius: Prediction of oxygen mass transfer coefficients in stirred bioreactors for bacteria, yeasts and fungus broths. En: *Biochemical Engineering Journal* 20 (2004), Nr. 1, p. 85–94
- [27] GARCIA, Herncin E. ; GORDON, Louis I.: Oxygen solubility in seawater: Better fitting equations. En: *Limnology and oceanography* 37 (1992), Nr. 6, p. 1307–1312
- [28] GHOSH, Rajesh ; BHATTACHERJEE, Sounak: Mass Transfer Coefficient Evaluation for Pilot Scale Fermenter Using Sodium Sulphite Oxidation Method. 2 (2013), Nr. 4, p. 669–673
- [29] GIEBNER, Fabian ; EISEN, Sebastian ; SCHLÖMANN, Michael ; SCHOPF, Simone: Measurements of dissolved oxygen in bioleaching reactors by optode application. En: *Hydrometallurgy* 168 (2016), p. 64–68. – ISBN 0304–386X
- [30] GILLOT, S ; CAPELA-MARSAL, S ; ROUSTAN, M ; HÉDUIT, A: Predicting oxygen transfer of fine bubble diffused aeration systems model issued from dimensional analysis. En: *Water research* 39 (2005), Nr. 7, p. 1379–1387
- [31] HAMAWAND, Ihsan B. ; HANNA, Fadi Z. ; MOHAMMED, Thamer J.: The effect of surfactants on characteristics of hydrodynamic and mass transfer coefficient in gas-liquid dispersion column. En: *Engineering and Technology Journal* 25 (2007), Nr. 4, p. 591–607
- [32] HERMANN, Robert ; WALTHER, Nico ; MAIER, Ulrike ; BUCHS, Jochen: Optical method for the determination of the oxygen-transfer capacity of small bioreactors based on sulfite oxidation. En: *Biotechnology and Bioengineering* 74 (2001), Nr. 5, p. 355–363. – ISBN 0006–3592
- [33] HIGBIE, Ralph: The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. En: *Trans. AIChE* 31 (1935), p. 365–389
- [34] HUI, Pk ; PALMER, HJ: Uncatalyzed oxidation of aqueous sodium sulfite and its ability to simulate bacterial respiration. En: *Biotechnology and Bioengineering* 37 (1991), p. 392–396. – ISSN 0006–3592
- [35] JIN, Bo ; YIN, Pinghe ; LANT, Paul: Hydrodynamics and mass transfer coefficient in three-phase air-lift reactors containing activated sludge. En: *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* 45 (2006), Nr. 7, p. 608–617

- [36] JOSHI, JB ; SHARMA, MM: A circulation cell model for bubble columns. En: *Trans. Inst. Chem. Eng* 57 (1979), Nr. 4, p. 244
- [37] KASTANEK, F: The Volumetric Mass Transfer Coefficient in a Bubble Bed Column. En: *Chem. Eng. Commun.* 42 (1977), p. 2491–2499
- [38] KAWASE, Y ; HALARD, B ; MOO-YOUNG, M: Theoretical prediction of volumetric mass transfer coefficients in bubble columns for Newtonian and non-Newtonian fluids. En: *chemical Engineering science* 42 (1987), Nr. 7, p. 1609–1617
- [39] KELLAND, M A.: *Production Chemicals for the Oil and Gas Industry, Second Edition*. CRC Press, 2014. – ISBN 9781439873816
- [40] KHUDENKO, BM ; SHPIRT, Er: Hydrodynamic parameters of diffused air systems. En: *Water research* 20 (1986), Nr. 7, p. 905–915
- [41] KOLMOGOROV, Andrey N.: Dissipation of energy in locally isotropic turbulence. En: *Dokl. Akad. Nauk SSSR* Vol. 32, 1941, p. 16–18
- [42] KRISHNA, R ; VAN BATEN, JM: Mass transfer in bubble columns. En: *Catalysis today* 79 (2003), p. 67–75
- [43] KULKARNI, A ; SHAH, YT ; KELKAR, BG: Gas holdup in bubble column with surface-active agents: A theoretical model. En: *AIChE journal* 33 (1987), Nr. 4, p. 690–693
- [44] KULKARNI, Anand V.: Design of a pipe/ring type of sparger for a bubble column reactor. En: *Chemical Engineering & Technology* 33 (2010), Nr. 6, p. 1015–1022
- [45] LEE, JC ; MEYRICK, DL: Gas-liquid interfacial areas in salt solutions in an agitated tank. En: *TRANSACTIONS OF THE INSTITUTION OF CHEMICAL ENGINEERS AND THE CHEMICAL ENGINEER* 48 (1970), Nr. 2, p. T37
- [46] MOLTZER, Meike: *Analysis of Robust Stability of Model Predictive Control for Biological Wastewater Treatment Plants*, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, Holanda, Tesis de Maestría, 2008. – 93 p.
- [47] PEÑA GUZMÁN, Carlos A.: Control de oxígeno disuelto en un tanque de aireación de una planta piloto de lodos activados. (2012)
- [48] PITTOORS, Erika ; GUO, Yaping ; WH VAN HULLE, Stijn: Modeling dissolved oxygen concentration for optimizing aeration systems and reducing oxygen consumption in activated sludge processes: a review. En: *Chemical Engineering Communications* 201 (2014), Nr. 8, p. 983–1002
- [49] RAMALHO, Rubens S. ; BELTRÁN, Domingo J. ; DE LORA, Federico: *Tratamiento de aguas residuales*. Reverté, 1990

- [50] REYNOLDS, Kelly A.: Tratamiento de aguas residuales en Latinoamérica. En: *Latinoamérica* (2001), p. 48–49
- [51] ROCHE, Rossany: *Modelado matemático de la célula cardiaca.*, Universidad Simón Bolívar. Caracas, Venezuela, Tesis de Maestría, 2005. – 265 p.
- [52] SAUTER, Josef: *Die Grössenbestimmung der im Gemischnebel von Verbrennungskraftmaschinen vohrhandenen Brennstoffteilchen:(Mitteilung aus dem Laboratorium für Technische Physik der Technischen Hochschule München).* VDI-Verlag, 1926
- [53] SCHIERHOLZ, Erica L. ; GULLIVER, John S. ; WILHELMS, Steven C. ; HENNEMAN, Heather E.: Gas transfer from air diffusers. En: *Water research* 40 (2006), Nr. 5, p. 1018–1026
- [54] SHI, Yan ; ZHAN, Xiancheng ; MA, Lie ; LI, Linli ; LI, Chengrong: Evaluation of antioxidants using oxidation reaction rate constants. En: *Frontiers of Chemistry in China* 2 (2007), Nr. 2, p. 140–145
- [55] SIVAJI, K. ; MURTY, G. S. R. N.: Kinetics of Sulfite Oxidation Reaction. En: *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals* 21 (1982), Nr. 4, p. 344–352. – ISBN 0196–4313
- [56] SMITH, Carlos A. ; CORRIPIO, Armando B.: *Principles and practice of automatic process control.* Vol. 2. Wiley New York, 1985
- [57] TREYBAL, Robert E. ; GARCÍA RODRÍGUEZ, Amelia [u. a.]: *Operaciones de transferencia de masa.* 1988
- [58] TSUGE, Hideki ; HIBINO, Shin-Ichi: Bubble formation from an orifice submerged in liquids. En: *Chemical Engineering Communications* 22 (1983), Nr. 1-2, p. 63–79
- [59] VAKHSHOURI, K ; GRACE, JR: Modeling of bubble formation at a submerged orifice in a gas-fluidized bed. En: *Chemical Engineering Research and Design* 87 (2009), Nr. 6, p. 843–851
- [60] WANG, Li D. ; MA, Yong L. ; HAO, Ji M. ; ZHAO, Yi: Mechanism and kinetics of sulfite Oxidation in the presence of ethanol. En: *Industrial and Engineering Chemistry Research* 48 (2009), Nr. 9, p. 4307–4311. – ISBN 0888–5885
- [61] WINKLER, Michael A. [u. a.]: *Biological treatment of waste-water.* Ellis Horwood, 1981
- [62] YAGI, Hideharu ; YOSHIDA, Fumitake: Gas absorption by Newtonian and non-Newtonian fluids in sparged agitated vessels. En: *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development* 14 (1975), Nr. 4, p. 488–493
- [63] YANG, GQ ; LUO, X ; LAU, R ; FAN, LS: Bubble formation in high-pressure liquid–solid suspensions with plenum pressure fluctuation. En: *AIChE journal* 46 (2000), Nr. 11, p. 2162–2174